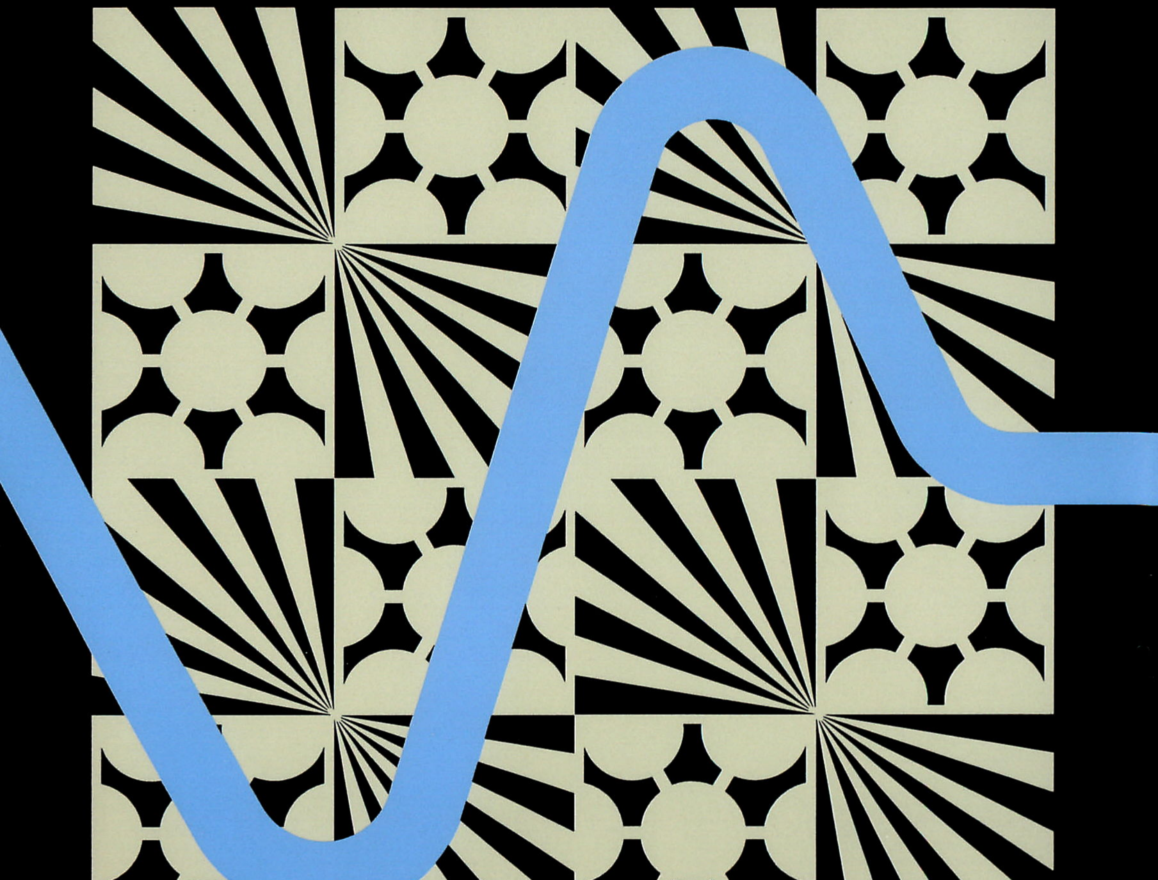
量子力学 II

猪木慶治・川合　光／著



講談社サイエンティフィク

量子力学 II

猪木慶治・川合　光／著

講談社サイエンティフィク

序　文

現代物理学のどの分野を学ぶにも，いまや量子力学の理解は必要不可欠なものになっているといっても過言ではなかろう．

本書は，数年にわたって東京大学理学部物理学科 3 年生の前期と後期で行ってきた量子力学の講義をもとにし，大幅に改良を加え発展させながらできあがったものである．学生諸君や同僚研究者との多くの論議は説明の仕方をわかりやすくするのに大いに役立った．

量子力学に親しんでゆくためには，概念の理解とともに演習問題を実際に自分で解いてゆくことが有益であるという教訓を最大限に取り入れたのが本書の特色である．したがって，内容の理解を助けるために，例題をふんだんに取り入れた．また，節末には節末問題と解説を加え，内容の理解がさらに深まるよう配慮した．各章末には，さらに高度な問題や，本文でふれることのできなかった概念をも章末問題として取り上げ，全問題に詳しい解説をつけた．はじめて読むときは，章末問題をスキップしてもよいが，再度読まれるときには，これにもチャレンジしていただきたい．本書を読む予備知識としては，大学教養程度の数学，解析力学，電磁気学を要求するにとどめ，あとは読んでわかるように説明を心がけた．本書だけで量子力学の勉強を完結できるよう心がけたつもりである．また，すでに量子力学を学んだ大学院生，研究者が復習するためのものとしても問題を通じて理解するこの方式は十分有益であろう．なお全章にわたって，$\hbar$, c は省略せず，いろいろな物理量の次元をはっきりさせておいた．

章末問題に取り上げた問題の一部は，量子力学の講義と並行して行われた学部 3 年生の量子力学演習より使用させていただいた．当時の演習を担当してくださった方々，とくに，東島 清博士，清水清孝博士，北沢良久博士，小川 格博士，出口哲生博士をはじめ多くの方々に感謝したい．なお，本書の出版をお勧めくださった牟田泰三教授にも厚く御礼を申し上げる．また宮沢弘成教授には，長年にわたって，量子力学，素粒子物理学の研究に関して，おおいに御教授いただいたことを心から

感謝申し上げる．

本書の刊行には終始，講談社サイエンティフィクの太田一平氏の一方ならぬお世話になった．また原稿の整理，校正に関し，椛山裕人氏など多くの方々のお世話になった．厚く御礼申し上げたい．

1994 年 1 月

猪木慶治
川合　光

II 巻の構成

I 巻では，量子力学の基本的な概念を導入したが，本巻では，それをさらに発展させ具体的な問題に応用する．すなわち，概念的に重要な内容である磁場中の荷電粒子，摂動論，WKB法，同種粒子（第 8 章～第11章）の他に，散乱問題（第12章），原子・分子・原子核・素粒子（第13章）などの各論に応用した．さらに電磁場の量子化（第14章），Dirac方程式（第15章），経路積分（第16章）を扱って相対論的量子力学への入門とした．

目　　次

付　　録

第Ｉ巻の目次

第 8 章　磁場中の荷電粒子

外部から与えられた電磁場のなかでの粒子の運動を記述するのが，この章の目的である．はじめの 2 つの節では，電磁場の本質がゲージ不変性としてとらえられることを古典論および量子論の立場から議論する．古典論的には，一見不可思議にみえたゲージ不変性が，量子論では位相を変えることに対する不変性として自然に記述されるのは注目に値する．8.3 節では，Landau 準位，すなわち一様な磁場中の荷電粒子のエネルギー準位を考察する．これは物質の磁性の研究の基礎となるものである．8.4 節では，Aharonov-Bohm 効果を議論する．古典論的な運動方程式をみるかぎり，電場および磁場のほうがより基本的であり，スカラー・ポテンシャルやベクトル・ポテンシャルは人為的に導入されたもののように思われる．しかしながら，量子論では，ポテンシャルのほうがより基本的な量であることをみるだろう．最後に，8.5 節では，スピンをもつ粒子と磁場との相互作用を議論する．

8.1　外場中の古典粒子

外場として外部から与えられた電磁場のもとでの荷電粒子の運動を考えよう．ここで，荷電粒子じしんが生み出す電磁場は外場に比べて十分小さくて無視できる場合を考える．すなわち，外場は，一般に時間と空間座標に依存しているが，それは荷電粒子の運動の仕方にはよらずに，決まっているものと考える．外場のスカラー・ポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{x}, t)$，ベクトル・ポテンシャルを $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ とし，また荷電粒子の電荷を e とすると，この粒子のラグランジアンは，

$$L=\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2-e\phi(\boldsymbol{x}, t)+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\cdot\dot{\boldsymbol{x}} \tag{8.1}$$

と書ける．よく知られているように，このラグランジアンから導かれる Euler-Lagrange 方程式は，

$$m\ddot{\boldsymbol{x}}=e\left(\boldsymbol{E}+\frac{\dot{\boldsymbol{x}}}{c}\times\boldsymbol{B}\right) \tag{8.2}$$

の形になり，右辺は Lorentz 力である．ここで，電場 $\boldsymbol{E}$ および磁場 $\boldsymbol{B}$ は，

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{8.3.a}$$

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A} \tag{8.3.b}$$

で与えられる．

例題 1　(8.1) から (8.2)，(8.3a)，(8.3b) を導け．

解　粒子の座標を $x^i(i=1, 2, 3)$ のように成分で書いたほうが便利である．ラグランジアンは，

$$L=\frac{m}{2}(\dot{x}^i)^2-e\phi+\frac{e}{c}A^i\dot{x}^i$$

と書ける．Euler-Lagrange 方程式は，

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}^i}-\frac{\partial L}{\partial x^i}=0$$

であるが，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}^i}&=\frac{d}{dt}\left(m\dot{x}^i+\frac{e}{c}A^i\right)\\&=m\ddot{x}^i+\frac{e}{c}\frac{\partial A^i}{\partial t}+\frac{e}{c}(\partial_jA^i)\dot{x}^j\end{aligned}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x^i}=-e\partial_i\phi+\frac{e}{c}(\partial_iA^j)\dot{x}^j$$

を使ってまとめると，

$$m\ddot{x}^i = e\left(-\partial_i\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial A^i}{\partial t}\right) + \frac{e}{c}(\partial_i A^j - \partial_j A^i)\dot{x}^j \qquad ⓐ$$

と書ける[1]．電場 E_i および磁場 B_i を，

$$-\partial_i\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial A^i}{\partial t} = E_i \qquad ⓑ$$

$$\partial_i A^j - \partial_j A^i = \varepsilon_{ijk}B_k \qquad ⓒ$$

で定義すると，ⓐは，

$$m\ddot{x}^i = eE_i + \frac{e}{c}\varepsilon_{ijk}\dot{x}^j B_k$$

となり，(8.2)が得られた． ▮

このように古典力学では，荷電粒子の運動方程式には，スカラー・ポテンシャルやベクトル・ポテンシャルは電場および磁場の形で現れるだけである．そのため，古典力学的な場合には，電場および磁場が物理的な量であって，ポテンシャルは便宜的に導入したものと考えても困難は生じない．実際，古典論では，Lorentz 力の式のみならず，電磁場の運動方程式である Maxwell 方程式も電場および磁場に対して閉じた形で書かれている．

このように，運動方程式にはスカラー・ポテンシャルやベクトル・ポテンシャルは直接現れないのであるが，ラグランジアンを書こうとすると，ポテンシャルのほうが電磁場よりも基本的であるようにみえる．いままでみてきたように，量子力学では，古典的な運動方程式よりもラグランジアンやハミルトニアンのほうが基本的な概念であるから，量子論では電磁場そのものよりもポテンシャルのほうが自然な量であると思ったほうがよい．

ところで，ラグランジアン (8.1) によって記述される粒子の運動は，外場 $\phi(\boldsymbol{x},t)$，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ に対するゲージ変換に対して不変であることに注意しよう．すなわち，$\phi(\boldsymbol{x},t)$，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ を次のようにゲージ変換したもの

$$\phi(\boldsymbol{x},t) \mapsto \phi'(\boldsymbol{x},t) = \phi(\boldsymbol{x},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\boldsymbol{x},t) \qquad (8.4a)$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) \mapsto \boldsymbol{A}'(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) - \nabla\lambda(\boldsymbol{x},t) \qquad (8.4b)$$

にとりかえても，粒子の運動は変化しない．ここで λ は時間および空間座標の任意の関数である．

例題 2 上の主張を証明せよ．

---

1) ∂_i は x^i による微分 $\dfrac{\partial}{\partial x^i}$ を表す．

解　$\phi(\boldsymbol{x}, t)$, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ を上の $\phi'(\boldsymbol{x}, t)$, $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{x}, t)$ にとりかえると，ラグランジアン (8.1) は，

$$\begin{aligned} L \mapsto L' &= \frac{m}{2}\dot{x}^2 - e\phi'(\boldsymbol{x}, t) + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{x}, t)\dot{\boldsymbol{x}} \\ &= L - \frac{e}{c}\left(\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\boldsymbol{x}, t) + \nabla\lambda(\boldsymbol{x}, t)\cdot\dot{\boldsymbol{x}}\right) \\ &= L - \frac{e}{c}\frac{d}{dt}\lambda \end{aligned}$$

のように変わるが，変化分は時間の全微分であるから，運動には影響を与えない．

あるいは，ゲージ変換(8.4)に対して，電場および磁場が変化しないことからも，運動方程式 (8.2) が不変であることは明らかである．　∎

次に，いま考えている系のハミルトニアンを求めてみよう．ラグランジアン (8.1) から $\boldsymbol{x}$ の正準共役量 $\boldsymbol{p}$ は，

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = m\dot{\boldsymbol{x}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{8.5}$$

となるから，ハミルトニアンは，

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}} - L \\ &= \left(m\dot{\boldsymbol{x}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\dot{\boldsymbol{x}} - \left(\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2 - e\phi + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\dot{\boldsymbol{x}}\right) \\ &= \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2 + e\phi \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi \end{aligned} \tag{8.6}$$

と書ける．ここで，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ はハミルトニアンのなかに特徴的な現れ方をしていることに注意しよう．すなわち，磁場がないときの運動エネルギーの表式 $\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2$ に対して，おきかえ

$$\boldsymbol{p} \mapsto \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{8.7}$$

を行うことによって，磁場がある場合のハミルトニアンが得られる．このような見方は，スカラー・ポテンシャルにも適用できる．すなわち，ハミルトニアン (8.6) は自由粒子の場合のハミルトニアンを与える式

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 \tag{8.8}$$

に対して，おきかえ

$$H \mapsto H - e\phi \tag{8.9a}$$

$$\boldsymbol{p} \mapsto \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{8.9b}$$

を行うことによって得られたものとみなすことができる．

［問題1］ Hamilton 形式では，ゲージ変換 (8.4) は $\lambda(\boldsymbol{x}, t)$ を母関数とする正準変換であることを示せ．

［解］ Hamilton 形式での作用の表式

$$S = \int dt \{\boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, t)\}$$

で，被積分関数に全微分 $-\dfrac{e}{c}\dfrac{d}{dt}\lambda(\boldsymbol{x}, t)$ をつけ加えると，作用は，

$$\begin{aligned} S' &= \int dt \left\{\boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, t) - \frac{e}{c}\nabla\lambda \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - \frac{e}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right\} \\ &= \int dt \left\{\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\nabla\lambda\right) \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - \left(H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, t) + \frac{e}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right)\right\} \end{aligned}$$

となる．すなわち，変換

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{p} \mapsto \boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\nabla\lambda \\ &\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} \\ &H \mapsto H' = H + \frac{e}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

は正準変換である．ここで，とくに，

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi$$

とすると，

$$\begin{aligned} H' &= H + \frac{e}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t} \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi + \frac{e}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t} \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}' - \frac{e}{c}(\boldsymbol{A} - \nabla\lambda)\right)^2 + e\left(\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}' - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + e\phi' \end{aligned}$$

となる．ここで，最後の式を得るために，$\boldsymbol{A}'$，ϕ' を，

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} - \nabla\lambda \\ &\phi' = \phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

で定義したが，これはゲージ変換の表式 (8.4) と同じ形をしている．すなわち，

ゲージ変換が上のような正準変換として与えられることがわかった．■

8.2　外場中の粒子の量子力学

外場のなかにおかれた粒子の量子力学的なハミルトニアンを求めるためには，通常の手続きに従って，古典的なハミルトニアン(8.6)で変数 $\boldsymbol{x}$ および $\boldsymbol{p}$ を対応する演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$ でおきかえればよいと思われる．すなわち，素朴に考えて，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right)^2+e\phi(\hat{\boldsymbol{x}},t) \tag{8.10}$$

とすればよいであろう．ここで，古典的なハミルトニアン (8.6) から量子力学的なハミルトニアン (8.10) を得る際には，演算子の積の順序についての不定性があることに注意しよう．

例題1　古典的なハミルトニアン(8.6)を次の2つの形に書いてから，$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{p}$ を演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$ におきかえたとき，どの程度のずれがあるか具体的に計算せよ．また，どちらの場合にハミルトニアンはエルミートになるか．

(i)
$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+e\phi$$

(ii)
$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}^2-2\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\right)+e\phi$$

解　(i)および(ii)で，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{x}$ を $\hat{\boldsymbol{p}}$，$\hat{\boldsymbol{x}}$ におきかえたものを，それぞれ $\hat{H}_1$，$\hat{H}_2$ とすると，

$$\begin{aligned}\hat{H}_1-\hat{H}_2&=\frac{1}{2m}\frac{e}{c}\left(\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right)\\&=\frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\end{aligned}$$

が得られる．

$\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)$ は明らかにエルミートであるから，$\hat{H}_1$ はエルミートである．$\hat{H}_1-\hat{H}_2$ はエルミートではないから，$\hat{H}_2$ はエルミートではない．■

上の例題からわかるように，(8.10) で与えられる $\hat{H}$ はエルミート性の観点からも自然なものであるが，以下にみるようにゲージ不変性の観点からもきわめて自然な形になっている．ゲージ不変性を調べるために，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$$
$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right)^2+e\phi(\hat{\boldsymbol{x}},t) \tag{8.11}$$

を考え，波動関数に対して次のような時間に依存したユニタリー変換を考えよう．

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t)|\psi'(t)\rangle$$
$$\hat{U}(t)=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right] \tag{8.12}$$

$|\psi'(t)\rangle$ の時間発展を求めるためには，(8.12) を (8.11) に代入してやればよい．すなわち，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}\Big(\hat{U}(t)|\psi'(t)\rangle\Big) \\ &= \hat{U}(t)\Big(i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'(t)\rangle+\Big(\hat{U}^{-1}(t)i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t)\Big)|\psi'(t)\rangle\Big) \\ &= \hat{U}(t)\Big(i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'(t)\rangle-\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)|\psi'(t)\rangle\Big) \end{aligned} \tag{8.13}$$

と，

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle=\hat{H}\hat{U}(t)|\psi'(t)\rangle \tag{8.14}$$

を等しいとおいて，両辺に $\hat{U}^{-1}(t)$ をかけると，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'(t)\rangle=\hat{H}'|\psi'(t)\rangle$$
$$\hat{H}'=\hat{U}^{-1}(t)\hat{H}\hat{U}(t)+\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t) \tag{8.15}$$

が得られる．

例題 2 $\hat{H}$ の表式 (8.10) の $\boldsymbol{A}$ および ϕ を，それらにゲージ変換 (8.4) を施したものでおきかえると，上の $\hat{H}'$ が得られることを示せ．

解 (8.15) の右辺の $\hat{H}$ に (8.10) を代入すると，

$$\hat{H}'=\frac{1}{2m}\left\{\hat{U}^{-1}\Big(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\Big)\hat{U}\right\}^2+e\phi(\hat{\boldsymbol{x}},t)+\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)$$

となる．ここで，U は $\hat{\boldsymbol{x}}$ のみの関数だから，$\hat{\boldsymbol{x}}$ の任意関数と可換であることに注意しよう．さらに，

$$\begin{aligned} &\hat{U}^{-1}\Big(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\Big)\hat{U} \\ &=\exp\left[-i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right]\Big(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\Big)\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right] \\ &=\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}(\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)-\nabla\lambda(\hat{\boldsymbol{x}},t)) \end{aligned}$$

に注意すると，

$$\hat{H}'=\frac{1}{2m}\Big(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'(\hat{\boldsymbol{x}},t)\Big)^2+e\phi'(\hat{\boldsymbol{x}},t)$$

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}-\nabla\lambda,\quad \phi'=\phi+\frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}$$

であることは明らかであろう．　▮

この例題からわかるように，ゲージ変換が(8.12)の形のユニタリー変換に表せたのは，ハミルトニアンのなかで運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ とベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)$ が，$\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)$ という特別の組み合わせでのみ現れたからである．ところで，(8.12)の形のユニタリー変換は，座標表示では単なる位相変換である．すなわち，(8.12)は，

$$\langle\boldsymbol{x}\,|\,\psi(t)\rangle=\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{8.16 a}$$

$$\langle\boldsymbol{x}\,|\,\psi'(t)\rangle=\psi'(\boldsymbol{x},t) \tag{8.16 b}$$

に対して，

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\boldsymbol{x},t)\right]\psi'(\boldsymbol{x},t) \tag{8.17}$$

と書けるが，これは時間および空間座標に依存した位相変換にほかならない．これは，確率密度 $|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$ がゲージ変換に対して不変であること，すなわち，ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ および ϕ をどのようなゲージで表しておいても，物理の内容は同じであることを示している．逆にいうと，量子論においても，物理的内容が外場のポテンシャルのゲージのとり方に依存しないということを要請すると，(8.10)の形のハミルトニアンがきわめて自然なものであることがわかる．このように，外場がないときのハミルトニアンから，

$$\hat{\boldsymbol{p}}\mapsto\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)$$

のようなおきかえで，外場があるときのハミルトニアンをつくることができる．

[問題 2]　スカラー・ポテンシャルとベクトル・ポテンシャルをまとめて4元共変ベクトル A_μ と書き，時間および空間座標による微分をまとめて4元共変ベクトル ∂_μ と書く．すなわち，$A_\mu=(\phi,-\boldsymbol{A})$ および $\partial_\mu=\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t},\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\right)$ とする．

(1) ゲージ変換はまとめて，

$$A_\mu\mapsto A_\mu+\partial_\mu\lambda$$

の形に書けることを示せ．

(2) 共変微分 D_μ を，

$$D_\mu=\partial_\mu+i\frac{e}{\hbar c}A_\mu$$

で定義すると，上のゲージ変換に対して，D_μ は微分作用素として，

$$D_\mu \mapsto \exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)D_\mu \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)$$

のように変わることを示せ．

(3) 自由粒子の Schrödinger 方程式は，上の記号を使うと，

$$\left(i\hbar c\, \partial_0+\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i{}^2\right)\psi(\boldsymbol{x},t)=0$$

と書ける．ここで，$\partial_\mu=(\partial_0, \partial_i)$ を D_μ でおきかえたものを作ると，

$$\left(i\hbar c D_0+\frac{\hbar^2}{2m}D_i{}^2\right)\psi(\boldsymbol{x},t)=0 \qquad ①$$

になるが，これは次のゲージ変換

$$\begin{cases} A_\mu \mapsto A_\mu+\partial_\mu\lambda \\ \psi \mapsto \exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)\psi \end{cases}$$

で不変であることを示せ．

(4) 上の方程式①は，外場中の Schrödinger 方程式 (8.11) にほかならないことをチェックせよ．

(5) 共変微分の交換子を $[D_\mu,\ D_\nu]=i\frac{e}{\hbar c}F_{\mu\nu}$ とする．$F_{\mu\nu}$ を電場 $\boldsymbol{E}$ および磁場 $\boldsymbol{B}$ で表せ．

[解] (1) 変換 $A_\mu \mapsto A_\mu+\partial_\mu\lambda$ の第ゼロ成分および第 i 成分はそれぞれ，

$$\phi \mapsto \phi+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda$$

$$-A^i \mapsto -A^i+\frac{\partial}{\partial x^i}\lambda$$

であるが，これはゲージ変換 (8.4) にほかならない．

(2) $D_\mu=\partial_\mu+i\frac{e}{\hbar c}A_\mu$ のなかの A_μ を $A_\mu+\partial_\mu\lambda$ でおきかえると，

$$D_\mu \mapsto \partial_\mu+i\frac{e}{\hbar c}(A_\mu+\partial_\mu\lambda)$$

となるが，これは，

$$\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)D_\mu \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)$$

に等しい．

(3) (2) の結果を使うと，ここで与えられたゲージ変換に対して，

$$D_\mu\psi \mapsto \left(\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)D_\mu \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)\right)\left(\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)\psi\right)$$
$$=\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)D_\mu\psi$$

であることがわかる．これは，ゲージ変換に対して ψ と $D_\mu\psi$ は同様に変換することを示しているから，D_μ をいくつ ψ に作用させても ψ と同じ変換性を示す．すなわち，ゲージ変換に対して，

$$D_{\mu_1}\cdots D_{\mu_n}\psi \mapsto \exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)D_{\mu_1}\cdots D_{\mu_n}\psi$$

となる（これが，共変微分の名前の由来である）．これは，方程式①の左辺にゲージ変換を施したものは，全体に $\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\lambda\right)$ がかかるだけであり，それをゼロとおいた式，すなわち，方程式①はゲージ変換に対して不変であることを意味している．

(4) ①のなかの D_0，D_i が，

$$cD_0=\frac{\partial}{\partial t}+i\frac{e}{\hbar}\phi,\quad D_i=\frac{\partial}{\partial x^i}-i\frac{e}{\hbar c}A^i$$

であることに注意すれば，容易に確かめられる．

(5) $[D_\mu, D_\nu]=\left[\partial_\mu+i\frac{e}{\hbar c}A_\mu,\ \ \partial_\nu+i\frac{e}{\hbar c}A_\nu\right]$

$$=i\frac{e}{\hbar c}(\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu)$$

となるから，

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu$$

であるが，

$$F_{0i}=-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A^i-\partial_i\phi=E_i$$
$$F_{ij}=-\partial_i A^j+\partial_j A^i=-\varepsilon_{ijk}B_k \quad ∎$$

[問題 3]　外場中の荷電粒子の確率密度流の表式を導け．

[解]　外場中の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi\right\}\psi \qquad ⓐ$$

の複素共役をとると，

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla+\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi\right\}\psi^* \qquad ⓑ$$

となる．ⓐの両辺に ψ^* をかけ，ⓑの両辺に ψ をかけて辺々引き算すると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi^*\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi-\left(\left(\nabla+\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi^*\right)\psi\right\}$$

となるが，少し計算すると右辺は，

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left\{\psi^*\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\psi-\left(\left(\nabla+\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\psi^*\right)\psi\right\}$$

と変形できることがわかる．すなわち，ρ と $\boldsymbol{j}$ を

$$\rho=\psi^*\psi$$
$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\psi^*\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\psi-\left(\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\psi\right)^*\psi\right\}$$

で定義すると，連続の式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot\boldsymbol{j}$$

をみたすから，$\boldsymbol{j}$ を確率密度流とみなすことができる．この表式は，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ のときの確率密度流の表式

$$\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi)^*\psi\right\}$$

で形式的に微分 ∇ を共変微分 $\nabla-\dfrac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}$ でおきかえたものになっている． ∎

8.3 一様な磁場中の荷電粒子

一様な磁場中の荷電粒子のエネルギー準位を考えよう．簡単のため，磁場は，z 軸に平行とし，磁場の大きさを B，荷電粒子の質量および電荷を m および e とする．前節でみたように，物理的な結果はゲージのとり方に依存しないので，問題が解きやすくなるゲージを選べばよい．ここでは，Landau に従って，

$$A_x=0,\ A_y=Bx\quad,\quad A_z=0 \tag{8.18}$$

のようにとることにする．そうするとハミルトニアン (8.10) は，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x^2+\left(\hat{p}_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2+\hat{p}_z^2\right\} \tag{8.19}$$

と書ける．これは，$\hat{z}$ を陽に含まないから，明らかに $\hat{p}_z$ と $\hat{H}$ は可換であり，同時対角化可能である．

これは，物理的には z 方向の運動量が保存するということであり，直観的にも明らかであろう．z 方向の運動は，このように自明であるから，以下では x-y の方向の自由度だけを議論することにしよう．すなわち，2次元のハミルトニアン

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x{}^2+\left(\hat{p}_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2\right\} \tag{8.20}$$

を考える．この式を見ると，すぐわかるように，$\hat{H}$ は $\hat{y}$ を陽に含んでいないから，$\hat{p}_y$ と $\hat{H}$ は可換であり，同時対角化可能である．(8.18)のようなゲージを選んだのは，このように保存量を扱いやすい形にするためである．$\hat{p}_y$ の固有値が k_y であるような固有空間上では，ハミルトニアンは，

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x{}^2+\left(k_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2\right\}\\&=\frac{1}{2m}\hat{p}_x{}^2+\frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\left(\hat{x}-\frac{ck_y}{eB}\right)^2\end{aligned} \tag{8.21}$$

のように作用するが，これは，中心の x 座標が $\dfrac{ck_y}{eB}$ であるような調和振動子のハミルトニアンと同じ形をしている．ここで，角振動数に対応する量

$$\omega=\frac{|e|B}{mc} \tag{8.22}$$

は，サイクロトロン周波数とよばれている．調和振動子でよく知られているように，(8.21) のエネルギー準位は，

$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots) \tag{8.23}$$

で与えられるが，これらは Landau 準位とよばれている．

けっきょく，2 次元のハミルトニアン (8.20) の固有状態は k_y と n という 2 つの数でラベルされ，そのエネルギー固有値は k_y には依存せず，n のみによって決まることがわかった．ところで，いま考えている系が x-y 方向に無限に広がっているとすると，k_y は任意であり，(8.23)の各エネルギー準位は無限に縮退していることになる．各エネルギー準位の x-y 面の単位面積あたりの縮退度を求めるために，x 方向の長さを L_x，y 方向の長さを L_y とする周期的境界条件を考えよう．そうすると，$\hat{p}_y$ の固有値 k_y は，

$$k_y=\frac{2\pi\hbar}{L_y}l \qquad (l=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots) \tag{8.24}$$

の値をとりうるが，(8.21) からわかるように，x 方向の波動関数の中心は，$\dfrac{ck_y}{eB}=\dfrac{c}{eB}\dfrac{2\pi\hbar}{L_y}l$ であり，これが 0 と L_x の間にあるためには，

$$0\leqq\frac{c}{eB}\frac{2\pi\hbar}{L_y}l\leqq L_x \tag{8.25}$$

でなければならない．これは，l が 0 と $\frac{eB}{2\pi\hbar c}L_xL_y$ の間にあることを意味しているから，l は $\frac{|e|B}{2\pi\hbar c}L_xL_y$ 通りの値をとりうる．いいかえると，各 Landau 準位の縮退度は，x-y 方向の単位面積あたりに $\frac{|e|B}{2\pi\hbar c}$ であるとしてよい．

$$(\text{単位面積あたりの縮退度})=\frac{|e|B}{2\pi\hbar c} \tag{8.26}$$

あるいは，磁束の量子 $\Phi_0=\frac{2\pi\hbar c}{|e|}$ を使って表すと，各 Landau 準位の縮退度は，全磁束 $\Phi=BL_xL_y$ を Φ_0 でわったものといってもよい．

$$(\text{縮退度})=\frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{8.27}$$

［問題 4］　一様磁場中の 2 次元のハミルトニアン

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left\{\left(\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x(\hat{x},\hat{y})\right)^2+\left(\hat{p}_y-\frac{e}{c}A_y(\hat{x},\hat{y})\right)^2\right\}$$

を特定のゲージをとらずに対角化することを考えよう．

(1) $\hat{\Pi}_x$，$\hat{\Pi}_y$，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ を，

$$\hat{\Pi}_x=\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x(\hat{x},\hat{y})$$

$$\hat{\Pi}_y=\hat{p}_y-\frac{e}{c}A_y(\hat{x},\hat{y})$$

$$\hat{X}=\hat{x}+\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_y$$

$$\hat{Y}=\hat{y}-\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_x$$

で定義する．これらの間の交換子を計算せよ．

(2) $\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{\Pi}_x{}^2+\hat{\Pi}_y{}^2)$ に注意して，エネルギー準位と単位面積あたりの縮退度を求めよ．

［解］　(1) $[\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_y]=\left[\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x(\hat{x},\hat{y}),\ \hat{p}_y-\frac{e}{c}A_y(\hat{x},\hat{y})\right]$

$$=i\hbar\frac{e}{c}(\partial_xA_y-\partial_yA_x)=i\hbar\frac{eB}{c}$$

$$[\hat{\Pi}_x,\hat{X}]=\left[\hat{\Pi}_x,\hat{x}+\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_y\right]=[\hat{\Pi}_x,\hat{x}]+\frac{c}{eB}[\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_y]$$

$$=-i\hbar+\frac{c}{eB}\,i\hbar\frac{eB}{c}=0$$

$$[\hat{\Pi}_y, \hat{X}]=\left[\hat{\Pi}_y, \hat{x}+\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_y\right]=[\hat{\Pi}_y, \hat{x}]+\frac{c}{eB}[\hat{\Pi}_y, \hat{\Pi}_y]$$
$$=0$$

同様にして，$[\hat{\Pi}_x, \hat{Y}]=[\hat{\Pi}_y, \hat{Y}]=0$ がわかる．

また，

$$[\hat{X}, \hat{Y}]=\left[\hat{x}+\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_y,\ \hat{y}-\frac{c}{eB}\hat{\Pi}_x\right]$$
$$=-\frac{c}{eB}[\hat{x}, \hat{\Pi}_x]+\frac{c}{eB}[\hat{\Pi}_y, \hat{y}]+\left(\frac{c}{eB}\right)^2[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y]$$
$$=-i\hbar\frac{c}{eB}$$

以上をまとめると，つぎの結果がえられた．

$$\begin{cases} [\hat{X}, \hat{Y}]=-i\hbar\dfrac{c}{eB} \\ [\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y]=i\hbar\dfrac{eB}{c} \\ (\text{上記以外})=0 \end{cases}$$

(2) $\hat{P}=\hat{\Pi}_y$，$\hat{Q}=\dfrac{c}{eB}\hat{\Pi}_x$ とおくと，

$$[\hat{P}, \hat{Q}]=\frac{\hbar}{i}$$

であり，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{P}^2+\left(\frac{eB}{c}\right)^2\hat{Q}^2\right)$$
$$=\frac{1}{2m}\hat{P}^2+\frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\hat{Q}^2$$

と書けるが，これは角振動数 $\omega=\dfrac{|e|B}{mc}$ をもつ調和振動子にほかならない．ゆえに，エネルギー準位は，

$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$$

であることがわかる．

縮退は $\hat{X}$，$\hat{Y}$ が $\hat{H}$ と可換であることから生じていると考えてよい．ところで，$\hat{X}$ と $\dfrac{eB}{c}\hat{Y}$ は正準交換関係をみたしているが，一般に，正準変数 $\hat{p}$，$\hat{q}$ があったとき，位相空間の体積 $2\pi\hbar$ ごとに1つの量子状態が対応していたことを思い出そう．このことから，x-y 空間の単位面積あたりに，

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\cdot\frac{|e|B}{c}=\frac{|e|B}{2\pi\hbar c}$$

だけ状態があることがわかるが，これは (8.26) と一致している． ∎

8.4 Aharonov-Bohm 効果

外場のなかを運動する粒子は，古典論的には運動方程式

$$m\ddot{\boldsymbol{x}}=e\left(\boldsymbol{E}+\frac{\dot{\boldsymbol{x}}}{c}\times\boldsymbol{B}\right) \tag{8.2}$$

によって記述されるが，量子力学では，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$$

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right)^2+e\phi(\hat{\boldsymbol{x}},t) \tag{8.10}$$

によって記述される．この 2 つを見くらべてみると，次のような違いに気がつくであろう．古典論的な運動方程式には，外場は $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ として現れており，ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と ϕ は直接には現れない．すなわち，物理的に意味のある量は電場の強さ $\boldsymbol{E}$ および磁場の強さ $\boldsymbol{B}$ であって，ポテンシャルは補助的な量であると考えられる．一方，量子力学を考えると，ハミルトニアンにはスカラー・ポテンシャル ϕ とベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ が現れるのが自然であり，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ だけを使ってハミルトニアンを書こうとしても，自然な形にはならない．いいかえると，量子力学ではポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と ϕ じしんにも物理的な意味があると考えられる．

このような違いが形式上のことではなくて，物理的に本質的なものであることを示すために，静磁場中の粒子の運動について簡単な場合から考察することにしよう．静磁場中での粒子の Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{8.28}$$

で与えられるが，まず，いちばん簡単な場合としてつぎのような状況を考えよう．

磁場の強さ $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ が空間の全域でゼロのとき

この場合，ベクトル・ポテンシャルは，

$$\boldsymbol{A}=\nabla\chi \tag{8.29}$$

の形に書ける．いいかえると，ベクトル・ポテンシャルは $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ に対して χ をゲージ関数とするゲージ変換を施したものにすぎない．この場合は，8.2 節で議論したように，$\psi'(\boldsymbol{x},t)$ を，

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi(\boldsymbol{x})\right]\psi'(\boldsymbol{x},t) \tag{8.30}$$

によって定義すると，(8.28) は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi'(\boldsymbol{x},t) \tag{8.31}$$

のように，自由粒子の Schrödinger 方程式に変換される．このことは，ベクトル・ポテンシャルが (8.29) のように書けるとき，すなわち磁場の強さが空間の全域でゼロであれば，粒子の運動は本質的に自由運動であることを示しており，物理的に考えてももっともな結果である．もう少しだけ自明でない場合として，つぎの場合を考えよう．

空間の単連結な領域で磁場の強さがゼロであり，波束がその領域内を運動している場合

ここで，単連結な領域とは，そのなかで考えた任意の閉じた道が連続的に1点につぶしてしまえるような領域のことである．たとえば，球体の中味は単連結であるが，ドーナツの中味は単連結ではない．単連結な領域内で磁場の強さ $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ がゼロであるとすると，その領域内で定義されたスカラー関数 χ によって，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は (8.29) のように表される．なぜならば，$\boldsymbol{x}_0$ をその領域内の固定された点として，$\chi(\boldsymbol{x})$ を

$$\chi(\boldsymbol{x})=\int_{\substack{\boldsymbol{x}_0\\C}}^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' \tag{8.32}$$

によって定義すると，明らかに (8.29) をみたすからである．ここで，(8.32) の右辺は $\boldsymbol{x}_0$ と $\boldsymbol{x}$ を結ぶ領域内の経路 C に沿っての線積分であるが，領域が単連結であれば，線積分の結果は C のとり方には依存しないので，(8.32) によって確かに $\chi(\boldsymbol{x})$ は一価な関数として定義される．

例題1 領域が単連結ならば，(8.32) で定義される $\chi(\boldsymbol{x})$ は C のとり方によらないことを示せ．

解 $\boldsymbol{x}_0$ と $\boldsymbol{x}$ を結ぶ別の経路 C' をとったときに(図8.1)，(8.32) の右辺がどれだ

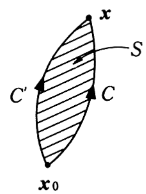


図8.1

け変化するか考えよう．明らかに，

$$\int_{C'} A(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' - \int_{C} A(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' = \oint_{C'-C} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}'$$

と書けるが，ここで $C'-C$ は C' に沿って $\boldsymbol{x}_0$ から $\boldsymbol{x}$ にいき，C を逆にたどって $\boldsymbol{x}_0$ にもどる閉じた経路である．仮定により，$C'-C$ は 1 点につぶせるから，$C'-C$ は領域内の曲面 S の境界となっている．Stokes の定理を使うと，

$$\oint_{C'-C} A(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' = \int_{S} (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot d\boldsymbol{S} = \int_{S} \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}$$

となるが，仮定により $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{0}$ であるから，これはゼロである．すなわち，(8.32) の右辺は経路 C のとり方に依存しない． ▮

けっきょく，単連結な領域内で磁場の強さがゼロであれば，その領域内で定義された一価関数 χ があって，ベクトル・ポテンシャルは $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ に χ によるゲージ変換を施したものとみなせるわけである．このことから，前に考えた場合とまったく同様にして，波束がその領域のなかで運動している限りは，本質的には自由運動と同じ運動をすることがわかる．

以上の準備をしたうえで，本節の主題であるつぎの場合を考えることにしよう．

空間の単連結でない領域で磁場の強さがゼロのとき

このような場合の典型的な例としては，図 8.2 (a) のようなトーラス型のソレノイドによる磁場が考えられる．この場合，磁場はトーラスの内側でだけゼロではなく，トーラスの外側では $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{0}$ となっているが，トーラスの外側の領域は単連結ではない．なぜなら，図 8.2 (a) で示したループ C はトーラスの外側の領域内で変形しても 1 点にはつぶせないからである．このとき，ベクトル・ポテンシャルを C に沿って線積分したものは，

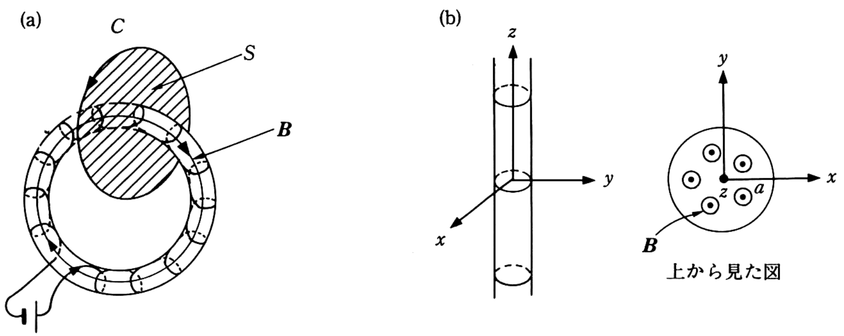


図 8.2 (a) トーラス型のソレノイド，(b) 無限に長いソレノイド

$$\oint_C \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x}=\int_S \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{S}=(S\text{ を貫く磁束}) \tag{8.33}$$

となり，ゼロではない．それゆえ，トーラスの外側の全域では，ベクトル・ポテンシャルを $\boldsymbol{A}=\nabla\chi$ の形に書くことはできない．計算を具体的に行うために，トーラスのかわりに図 8.2(b) のような無限に長いソレノイドを考えよう．この場合も，ソレノイドの外部を一周するループは，ソレノイドの外部の領域内でいくら変形しても 1 点につぶすことはできないから，ソレノイドの外部の領域は単連結ではない．ソレノイドは中心軸が z 軸と一致するように置かれており，半径は a，内部の磁場の強さは B で一様とし，外部にはもれていないとする．このような磁場を表すベクトル・ポテンシャルとしてはいろいろなとり方ができるが，一例としてここではつぎのような軸対称な形を考えよう．

ソレノイドの内部で，

$$\begin{cases} A_x=-\dfrac{B}{2}y \\ A_y=\dfrac{B}{2}x \\ A_z=0 \end{cases} \tag{8.34a}$$

ソレノイドの外部で，

$$\begin{cases} A_x=-\dfrac{B}{2}\dfrac{a^2}{x^2+y^2}y \\ A_y=\dfrac{B}{2}\dfrac{a^2}{x^2+y^2}x \\ A_z=0 \end{cases} \tag{8.34b}$$

もちろん，他のゲージのとり方をしてもよいが，8.2 節で議論したように，それらは全部同値である．

例題 2　(8.34) が実際に図 8.2(b) のソレノイドの磁場を与えることを示せ．

解　$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ によって直接磁場の強さを計算しても得られるが，ここではつぎのように考えてみよう．まず，(8.34) は，f を x^2+y^2 の関数として，

$$\begin{cases} A_x=-fy \\ A_y=fx \\ A_z=0 \end{cases}$$

の形をしているから，ベクトル場 $\boldsymbol{A}$ は z 軸のまわりに軸対称であり，しかもその向きは z 軸を中心とする円筒に接するようになっている (図 8.3)．$\boldsymbol{A}$ が軸対称であるから，当然 $\boldsymbol{B}$ も軸対称であるが，さらに，A_x，A_y は z に依存せず，しかも $A_z=0$

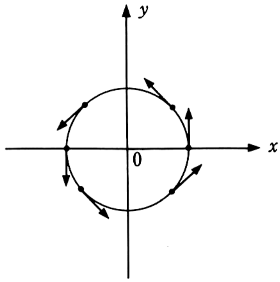


図 8.3

であるから，$\boldsymbol{B}$ は z 軸に平行である(たとえば，$B_x=\partial_y A_z-\partial_z A_y=0$)．磁場の大きさが本当にほしいものになっていることを示すために，x-y 面内で原点を中心とし，半径 ρ の円板を貫く磁束 $\Phi(\rho)$ を考えよう．ソレノイドの内側では磁場は B であり，外側ではゼロだから，

$$\Phi(\rho)=\begin{cases} B\pi\rho^2 & (\rho\leqq a) \\ B\pi a^2 & (\rho\geqq a) \end{cases} \qquad ⓐ$$

となっているはずである．一方，Stokes の定理より，一般に，

$$\Phi=\int_S \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}=\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x}$$

であるから，磁束 $\Phi(\rho)$ は，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を半径 ρ の円周に沿って線積分することにより求められる．(8.34)によると，半径 ρ のところにおけるベクトル・ポテンシャルの大きさは，

$$|\boldsymbol{A}|=\begin{cases} \dfrac{B}{2}\rho & (\rho\leqq a) \\ \dfrac{B}{2}\dfrac{a^2}{\rho} & (\rho\geqq a) \end{cases} \qquad ⓑ$$

であり，$\boldsymbol{A}$ は円周に接するから，線積分の値は単に $|\boldsymbol{A}|$ に円周の長さ $2\pi\rho$ をかけることにより得られる．ところが，ⓑ に $2\pi\rho$ をかけたものは，確かに ⓐ と一致している．すなわち，(8.34)により与えられるベクトル・ポテンシャルがつくる磁場はほしいものになっていることが示された． ▮

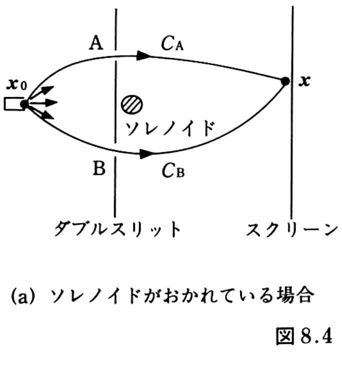
ところで，ソレノイドの外部では，磁場の強さ $\boldsymbol{B}$ はゼロであるが，どのようなゲージをとっても，ソレノイドの外部の領域全体で，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ とすることはできないことに注意しよう．なぜならば，Stokes の定理によると，ソレノイドの外側をまわるループに沿ってベクトル・ポテンシャルを線積分したものは，ソレノイドの作る全磁束

$B\pi a^2$ に等しく，これはゼロではないからである．このことは，波束がたとえソレノイドの外側の領域だけに限られていても，必ずしも自由運動と同じとはみなせなくなることを意味している．

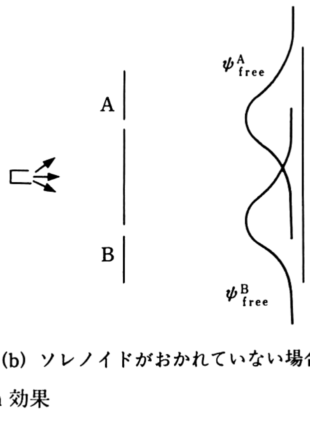
このように，量子力学では波束が磁場の強さ $\boldsymbol{B}=0$ の領域だけを通過していても，波束が通過しない部分の磁場の強さに依存して運動が変化することが起こりうる．そのような現象を一般に，Aharonov-Bohm 効果とよんでいるが，具体的に考えるために，図 8.4 (a) のようなダブルスリットの実験を調べよう．ここでは，2 つのスリットの間の影になる部分に，スリットと平行に無限に長いソレノイドがおかれている．このとき，スクリーンに現れる干渉パターンが，図 8.4 (b) のようにソレノイドがおかれていない場合と比べてどのように違ってくるかを考える．ソレノイドが作る磁場はソレノイドの内側に閉じこめられているし，しかも，電子の波束はソレノイドのそばを通らないので，図 8.4の(a) と (b) を見くらべてみると，一見 2 つの場合にはほとんど違いがないと思われる．しかし，それは古典論からのまちがった直観に基づいたものであって，以下に議論するように，Schrödinger 方程式 (8.28) から出発すると (a) と (b) の 2 つの場合に対して実際に異なる干渉パターンが得られることがわかる．

まず，ソレノイドがおかれていない場合を考えよう．この場合は，電子源から出た波束がスリット A を通ってスクリーンに到達したときの波動関数を $\psi^{\mathrm{A}}_{\mathrm{free}}(\boldsymbol{x})$ とし，スリット B を通ってスクリーンに到達したときの波動関数を $\psi^{\mathrm{B}}_{\mathrm{free}}(\boldsymbol{x})$ とすると，2 つのスリット A，B があるときのスクリーン上の波動関数は，当然

$$\psi_{\mathrm{free}}(\boldsymbol{x})=\psi^{\mathrm{A}}_{\mathrm{free}}(\boldsymbol{x})+\psi^{\mathrm{B}}_{\mathrm{free}}(\boldsymbol{x}) \tag{8.35}$$



(a) ソレノイドがおかれている場合



(b) ソレノイドがおかれていない場合

図 8.4　Aharonov-Bohm 効果

で与えられる．つぎに，ソレノイドがある場合を考える．まず，スリット A だけが開いているとすると，電子の波束は大まかにいって図 8.4 (a) で C_A と示したような曲線のそばの領域を動くはずである．そのような波束は，306 ページで議論したように，単連結な領域を運動していると考えてよいから，

$$\chi^{A}(\boldsymbol{x})=\int_{\boldsymbol{x}_0 \atop C_A}^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' \tag{8.36}$$

によるゲージ変換で，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ の場合の運動に帰着される．波動関数に対するゲージ変換が(8.30)の形で与えられたことを思い出すと，ソレノイドがあるときのスクリーン上での波動関数 $\psi^{A}_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})$ は，ソレノイドがない場合のスクリーン上での波動関数 $\psi^{A}_{\text{free}}(\boldsymbol{x})$ を使って，

$$\psi^{A}_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{A}(\boldsymbol{x})\right]\psi^{A}_{\text{free}}(\boldsymbol{x}) \tag{8.37}$$

と書けることがわかる．まったく同様にして，スリット B だけが開いているときにも，ソレノイドがあるときのスクリーン上での波動関数 $\psi^{B}_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})$ を，ソレノイドがないときのスクリーン上での波動関数 $\psi^{B}_{\text{free}}(\boldsymbol{x})$ を使って，

$$\psi^{B}_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{B}(\boldsymbol{x})\right]\psi^{B}_{\text{free}}(\boldsymbol{x}) \tag{8.38}$$

と表すことができる．ここで，$\chi^{B}(\boldsymbol{x})$ は図 8.4 (a) に示されているように，スリット B を通る曲線 C_B に沿って，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を線積分したものである．

$$\chi^{B}(\boldsymbol{x})=\int_{\boldsymbol{x}_0 \atop C_B}^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}' \tag{8.39}$$

上の 2 つの結果 (8.37) と (8.38) を重ね合わせれば，2 つのスリット A，B が両方とも開いているときのスクリーン上の波動関数 $\psi_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})$ が得られる．

$$\psi_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{A}(\boldsymbol{x})\right]\psi^{A}_{\text{free}}(\boldsymbol{x})+\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{B}(\boldsymbol{x})\right]\psi^{B}_{\text{free}}(\boldsymbol{x}) \tag{8.40}$$

これを，

$$\psi_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{A}(\boldsymbol{x})\right]\left\{\psi^{A}_{\text{free}}(\boldsymbol{x})+\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\{\chi^{B}(\boldsymbol{x})-\chi^{A}(\boldsymbol{x})\}\right]\psi^{B}_{\text{free}}(\boldsymbol{x})\right\} \tag{8.41}$$

と書きかえて，

$$\begin{aligned}\chi^{B}(\boldsymbol{x})-\chi^{A}(\boldsymbol{x})&=\int_{\boldsymbol{x}_0 \atop C_B}^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}'-\int_{\boldsymbol{x}_0 \atop C_A}^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}'\\&=\oint_{C_B-C_A}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot d\boldsymbol{x}'=(\text{ソレノイドの全磁束 }\Phi)\end{aligned} \tag{8.42}$$

であることに注意すると，けっきょく，

$$\psi_{\text{sole}}(\boldsymbol{x})=\exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi^{\text{A}}(\boldsymbol{x})\right]\left\{\psi_{\text{free}}^{\text{A}}(\boldsymbol{x})+\exp\left(i\frac{e\Phi}{\hbar c}\right)\psi_{\text{free}}^{\text{B}}(\boldsymbol{x})\right\} \tag{8.43}$$

が得られる．これをソレノイドがない場合 (8.35) と見比べてみると，$\psi_{\text{free}}^{\text{A}}$ と $\psi_{\text{free}}^{\text{B}}$ の相対的な位相が，ソレノイドの存在によって $\dfrac{e\Phi}{\hbar c}$ だけずれることがわかる．

以上のようにして，量子力学では，たとえ波束が通る領域で磁場の強さがゼロであっても，一般に粒子は磁場を感じることがわかった．もちろん，このような現象は波束が通る領域が単連結ではないという，純粋に量子論的な場合に生じるのであって，古典論的な極限では観察されなかったことと矛盾しない．大まかないい方をすると，古典論的には電場 $\boldsymbol{E}$ や磁場 $\boldsymbol{B}$ が本質的な物理量であり，ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と ϕ は補助的な量のように思われたが，量子力学ではポテンシャルのほうがより基本的な量と考えたほうがよいのである．最後に，つぎの例題のような多少不思議なことが起こることに注意しよう．

例題 3　上のダブルスリットの実験において，ソレノイドの全磁束がある特殊な値のときには，ソレノイドの影響が消えてしまい，自由な場合と同じ干渉パターンが見られる．それはどのようなときか．

解　(8.43) から，明らかに，

$$\frac{e\Phi}{\hbar c}=2\pi n \qquad (n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$$

のときは，$\exp\left(i\dfrac{e\Phi}{\hbar c}\right)=1$ となり，ソレノイドの効果は見えなくなってしまう．$n=1$ の場合の全磁束を Φ_0 と書くことにすると，上の条件は，

$$\Phi=n\Phi_0 \qquad (n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$$

と書ける．ここで，

$$\Phi_0=\frac{2\pi\hbar c}{e}$$

は，基本定数 e，$\hbar$，c から作られる磁束の次元をもった量であり，しばしば磁束量子とよばれる．　▮

8.5　スピンをもつ粒子の固有磁気モーメント

粒子がスピンをもっている場合を考えよう．少し乱暴な直観ではあるが，スピンを自転による角運動量とみなすことにすると，電荷をもったものが回転していれば当然，磁気モーメントももっているはずである．また，たとえ粒子の全電荷がゼロであっても，粒子に広がりがあって，正に帯電している部分と負に帯電している部

分があるとすると，回転によって生じる磁気モーメントは一般にはゼロではない．すなわち，スピンをもった粒子は軌道運動とは関係のない固有の磁気モーメントをもっていると考えられる．これを固有磁気モーメントとよんでいる．

粒子のスピン演算子を $\hat{S}$ とすると，$\hat{S}$ はベクトル量であり，スピンの状態を表す演算子は $\hat{S}$ だけであるから，固有磁気モーメントは $\hat{S}$ に比例するはずである．

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\frac{\mu}{S}\hat{\boldsymbol{S}} \tag{8.44}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{\mu}}$ は固有磁気モーメントの演算子であり，$\hat{S}$ に比例するはずであるが，その比例定数を $\frac{\mu}{S}$ と書いた．そうすると，$\hat{\boldsymbol{\mu}}$ の1つの成分，たとえば，$\hat{\mu}_z$ の最大の固有値は $|\mu|$ であり，μ が正のときは $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ と $\hat{S}$ は平行，μ が負のときは $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ と $\hat{S}$ は反平行であるということになる．

古典的には，磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ をもつ磁気双極子が磁場 $\boldsymbol{B}$ のなかにあるとすると，系には余分のエネルギー

$$\Delta E=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} \tag{8.45}$$

がつけ加わるから，量子力学的にもハミルトニアンに，

$$\Delta\hat{H}=-\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\boldsymbol{B}(\hat{\boldsymbol{x}})=-\frac{\mu}{S}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{8.46}$$

がつけ加わると考えるのは自然であろう．すなわち，電荷 e，磁気モーメント μ の非相対論的粒子が，外場のなかにあるときのハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right)^2+e\phi(\hat{\boldsymbol{x}},t)-\frac{\mu}{S}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{8.47}$$

で与えられる．このハミルトニアンは，8.2節の意味でゲージ不変になっていることに注意しよう．なぜならば，新たにつけ加えた項 (8.46) は，磁場の強さ $\boldsymbol{B}$ を含んでいるが，$\boldsymbol{B}$ はもともとゲージ不変な量であるからである．

固有磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ の大きさの程度

いろいろな粒子に対して μ の大きさは実験によって測定することができるが，それがどの程度の大きさの量であるかは，次のようなあらっぽい考察により得られるものと一致している．かなり粗雑ではあるが，いま考えている粒子は大きさが a 程度の剛体であり，全電荷 e，全質量 m をもつとしよう．このような剛体が角速度 ω で回転しているとき，その角運動量は $ma^2\omega$ 程度であり，磁気モーメントは，$\frac{e}{c}a^2\omega$ 程度であるから，その比は，

$$\frac{(\text{磁気モーメント})}{(\text{角運動量})} \sim \frac{\frac{e}{c}a^2\omega}{ma^2\omega} = \frac{e}{mc} \tag{8.48}$$

の程度の量である．ここで，a や ω は分母・分子で相殺していることに注意しよう．このような考察から，一般にスピンをもつ粒子に対して，μ と S の比がだいたい $\frac{\mu}{S} \sim \frac{e}{mc}$ 程度の量であることが予想される．S は一般に $\hbar$ の程度の量であるから，けっきょく，質量 m の粒子の磁気能率 μ は，

$$\mu \sim \frac{e\hbar}{mc} \tag{8.49}$$

の程度の大きさの量であると思われる．以下に示すように，実験値は確かにそのようになっている．

電子の固有磁気モーメント μ_{e} の測定値は，

$$\mu_{\mathrm{e}} = -\mu_{\mathrm{B}} \times (1.0011596\cdots) \tag{8.50}$$

である．ここで，μ_{B} は Bohr 磁子とよばれており，電子の質量 m_{e} を使って，

$$\mu_{\mathrm{B}} = \frac{|e|\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c} \tag{8.51}$$

で定義されている．同様に，陽子の固有磁気モーメント μ_{p} および中性子の固有磁気モーメント μ_{n} の測定値は，

$$\mu_{\mathrm{p}} = \mu_{\mathrm{N}} \times (2.793\cdots) \tag{8.52a}$$

$$\mu_{\mathrm{n}} = -\mu_{\mathrm{N}} \times (1.913\cdots) \tag{8.52b}$$

である．ここで μ_{N} は核磁子とよばれており，陽子の質量 m_{p} を使って，

$$\mu_{\mathrm{N}} = \frac{|e|\hbar}{2m_{\mathrm{p}}c} \tag{8.53}$$

で定義されている．

このように，実際に固有磁気モーメントの大きさは (8.49) で与えた程度の量であるが，上で (8.49) を導くために使った自転というような描像をあまり本気にしてはいけない．スピンは広がりをもった物体の自転と考えるよりも，むしろ古典論的な対応をもたないような力学変数であり，ベクトル場がいくつかの成分をもっているように，波動関数がいくつかの成分をもっていることを示していると考えたほうがよい．実際，相対論的な量子力学を考えると，スピン $\frac{1}{2}$ の粒子が Dirac 方程式というもので自然に記述され，粒子の固有磁気モーメントが (8.49) 程度の量であることを示すことができる．

[問題5]　一様な磁場中にある電子のエネルギー準位を求めよ．

[解]　磁場は z 軸に平行で，大きさは B であるとする．ゲージとして(8.18)の形のもの

$$A_x=0,\quad A_y=Bx,\quad A_z=0$$

をとると，ハミルトニアン $\hat{H}$ (8.47) は，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x{}^2+\left(\hat{p}_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2+\hat{p}_z{}^2\right\}-\mu_e B\hat{\sigma}_z \qquad ⓐ$$

と書ける．ここで，μ_e は電子の固有磁気モーメントであり，(8.50)で数値を示した．

この $\hat{H}$ は，$\hat{\sigma}_z$ と可換であるから，$\hat{H}$ を対角化するためには，スピンが上向きの成分と下向きの成分を別々に考えてやればよい．ⓐの右辺の第1項は，スピンの効果を無視したときのハミルトニアンであり，8.3節で考えたものにほかならない．よってエネルギー準位は，サイクロトロン周波数 $\omega=\dfrac{|e|B}{mc}$ を使って，

$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\mu_e B \qquad (\text{スピンが上向きのとき})$$
$$(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$$
$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\mu_e B \qquad (\text{スピンが下向きのとき})$$
$$(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$$

と書ける．ところで(8.50)より $\mu_e=-\dfrac{|e|\hbar}{2mc}\times(1.0011596\cdots)$ であるが，これがもし，$\mu_e=-\dfrac{|e|\hbar}{2mc}$ であったとすると，スピンが上向きの n 番目の準位とスピンが下向きの $n+1$ 番目の準位は縮退してしまうことに注意しよう．　▮

第8章　章　末　問　題

[1]　z 方向に一様な磁場 B, x 方向に一様な電場 E が加えられている領域における電子の運動を考える．電子の z 方向の運動やスピンの自由度は考えないこととし，また，$E\ll B$ であるとする．

(1) ゲージとして，

$$A_x=0,\quad A_y=Bx,\quad A_z=0,\quad \phi=-Ex$$

の形のものをとり，ハミルトニアンを対角化せよ．

(2) 上で得られた各固有状態のもつ電荷密度 $\rho(x)$ と電流密度 $\boldsymbol{j}(x)$ を求めよ．

(3) ρ および $\boldsymbol{j}$ を x と z について積分したものの比

$$\frac{\int dx\, dz\, \boldsymbol{j}}{\int dx\, dz\, \rho}$$

を求めよ．結果を物理的に解釈せよ．

[解]　(1) このゲージでは，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x{}^2+\left(\hat{p}_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2\right\}-eE\hat{x}$$

と書ける．$\hat{p}_y$ と $\hat{H}$ は可換であるから，$\hat{p}_y$ の固有値を k_y とすると，その固有空間上では，

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x{}^2+\left(k_y-\frac{eB}{c}\hat{x}\right)^2\right\}-eE\hat{x}\\&=\frac{1}{2m}\hat{p}_x{}^2+\frac{m}{2}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\left\{\hat{x}-\left(\frac{ck_y}{eB}+\frac{mc^2}{eB}\frac{E}{B}\right)\right\}^2\\&\qquad-\left\{ck_y\frac{E}{B}+\frac{mc^2}{2}\left(\frac{E}{B}\right)^2\right\}\end{aligned} \qquad ⓐ$$

となる．これは，振動数 $\omega=\dfrac{|e|B}{mc}$ の調和振動子であるから，エネルギー準位は，

$$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\left(ck_y\frac{E}{B}+\frac{mc^2}{2}\left(\frac{E}{B}\right)^2\right)\quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots) \qquad ⓑ$$

で与えられる．$E=0$ のときは，これは k_y に依存しないので，Landau 準位は縮退しているが，$E\neq0$ ではその縮退は解けることに注意しよう．

(2) ⓑで与えられるエネルギー準位に対応する固有状態の波動関数は，

$$\varphi(x,\,y)=\exp\left(\frac{ik_y}{\hbar}y\right)\varphi_n(x)$$

である．ここで $\varphi_n(x)$ は，ⓐのような調和振動子の n 番目の準位の規格化された波動関数とする．$\varphi_n(x)$ は実数値関数としてよいことに注意しよう．電荷密度および電流密度は，［問題 3］(300 ページ)で求めた確率密度および確率密度流に e をかけたものであるから，

$$\rho=e\varphi^*\varphi=e\varphi_n(x)^2 \qquad ⓒ$$

$$\begin{aligned}j_x&=e\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\varphi^*\left(\frac{\partial}{\partial x}-\frac{ie}{\hbar c}A_x\right)\varphi-(\text{複素共役})\right\}\\&=e\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\varphi_n^*\frac{\partial}{\partial x}\varphi_n-\left(\frac{\partial}{\partial x}\varphi_n\right)^*\varphi_n\right\}\\&=0\end{aligned}$$

$$j_y = e\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\varphi^*\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ie}{\hbar c}A_y\right)\varphi - (\text{複素共役})\right\}$$

$$= e\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left\{\varphi^*\left(\frac{i}{\hbar}k_y - \frac{ie}{\hbar c}Bx\right)\varphi - (\text{複素共役})\right\}$$

$$= \frac{e}{m}\left(k_y - \frac{e}{c}Bx\right)\varphi_n(x)^2 \qquad ⓓ$$

を得る．

(3) z 方向の運動は無視しているから，z 積分は考えなくてよい．ⓒ，ⓓより，

$$\int dx\ \rho = e\int dx\ \varphi_n(x)^2 = e$$

$$\int dx\ j_y = \int dx \frac{e}{m}\left(k_y - \frac{e}{c}Bx\right)\varphi_n(x)^2$$

$$= \int dx\left[-\frac{e^2B}{mc}\left\{x - \left(\frac{ck_y}{eB} + \frac{mc^2}{eB}\frac{E}{B}\right)\right\} - ec\frac{E}{B}\right]\varphi_n(x)^2$$

$$= -ec\frac{E}{B}$$

となるから，けっきょく，

$$\frac{\int dx\ dz\ j_y}{\int dx\ dz\ \rho} = -c\frac{E}{B}$$

が得られる．これは，粒子が古典的には，円運動をしながら y 軸方向に速度 $-c\dfrac{E}{B}$ でドリフトしていくことに対応している．

[2]　図8.5のような形のマグネットを x 軸の上下に置くと，z 軸方向に勾配のある磁場ができる．左のほうから x 軸に沿って，スピン s をもつ中性の粒子を入射する．粒子の磁気モーメントはゼロでないとすると，スピンの z 成分 $\hat{s}_z$ の各固有値ごと

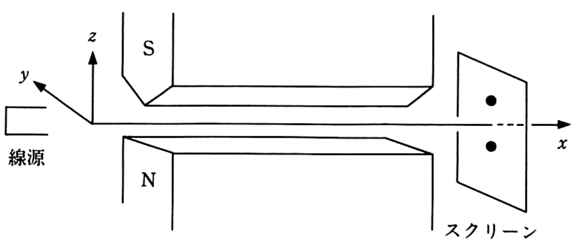


図8.5

に，粒子は磁場から異なる力を受ける．よって右のスクリーン上には，$\hat{s}_z$ の固有値に対応して $(2s+1)$ 個のスポットが現れる．このような装置を，Stern-Gerlach の装置とよんでいる．

(1) 入射粒子のスピンは $\dfrac{1}{2}$ とし，その質量および磁気能率を m，μ とする．また，マグネットは x 軸に沿って長さ l をもち，磁場の勾配 $\dfrac{\partial B_z}{\partial z}$ は一定であるとする．初速度を v とすると，磁場を通りぬけたとき，粒子は x 軸からどの程度ずれているか．
(2) (1)と同じ状況で，入射粒子はある単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の向きに偏極しているとする．すなわち，入射粒子は，$\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ の固有値が 1 であるような状態であるとする．この場合，スクリーン上ではどのようなことが観測されるか．

［解］ (1) スピン $\dfrac{1}{2}$ の中性粒子が磁場中にあるときのハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mu\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}(\hat{\boldsymbol{x}}) \qquad \text{ⓐ}$$

と書ける．粒子の波束は大まかにいって x-z 面内を運動するが，x-z 面内では $B_x=B_y=0$ であるから，ⓐで B_z だけ残して，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mu\hat{\sigma}_z\cdot B_z(\boldsymbol{x})$$

としてよい．これは $\hat{\sigma}_z$ と可換であるから，$\hat{\sigma}_z$ は保存すると考えてよい．すなわち，$\hat{\sigma}_z$ の固有値が σ_z であるような固有空間上では，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mu\sigma_z B_z(\boldsymbol{x})$$

で与えられる．この右辺の第 2 項は，z 軸方向の大きさ一定の力

$$F_z=\mu\sigma_z\frac{\partial B_z}{\partial z}$$

を表していることに注意しよう．すなわち，マグネットの間を通過する間は，z 軸方向に一定の加速度

$$\alpha=\frac{F_z}{m}=\sigma_z\frac{\mu}{m}\frac{\partial B_z}{\partial z}$$

を受ける．よって，通過後の位置のずれ Δz は，

$$\Delta z=\frac{1}{2}\alpha\left(\frac{l}{v}\right)^2=\sigma_z\frac{\mu l^2}{2mv^2}\frac{\partial B_z}{\partial z} \qquad \text{ⓑ}$$

で与えられる．

(2) 入射粒子の波動関数のスピン部分を $\zeta=\begin{pmatrix}\zeta_1\\ \zeta_2\end{pmatrix}$ と書くと，題意より，

$\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\zeta=\zeta$，すなわち，

$$\begin{pmatrix} n_z & n_x-in_y \\ n_x+in_y & -n_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\zeta_1\\ \zeta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\zeta_1\\ \zeta_2\end{pmatrix} \qquad ⓒ$$

をみたしている．ⓒの規格化された解は，

$$\begin{pmatrix}\zeta_1\\ \zeta_2\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+in_y\end{pmatrix}$$

と書け，これより，

$$|\zeta_1|^2=\frac{1+n_z}{2},\quad |\zeta_2|^2=\frac{1-n_z}{2}$$

であることがわかる．よって，粒子がスクリーン上で $\sigma_z=1$ および $\sigma_z=-1$ に対応する点（ⓑをみよ）に観測される確率は，それぞれ，$\dfrac{1+n_z}{2}$，および $\dfrac{1-n_z}{2}$ である．

第9章 摂　動　論

現実的な系のハミルトニアンは，かなり複雑なものであり，Shrödinger 方程式を厳密に解くのは難しいことが多い．しかしながら，ハミルトニアンを，$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ のようにうまく分解したとき，$\hat{H}_0$ は厳密にとりあつかえて，$\hat{V}$ の効果はそれからのずれとして考えることができる場合も多い．このように，ハミルトニアンを 2 つの部分に分けて，一方を厳密に解いて残りの効果をべき展開する方法を摂動論という．本章では，はじめに摂動論によるハミルトニアンの対角化を議論し，つぎに波動関数の時間発展が摂動によってどのように影響を受けるかを議論する．

9.1　時間によらない摂動論 I — 縮退のない場合

いま，ハミルトニアン $\hat{H}$ が，$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ の形に書けており，$\hat{H}_0$ に対しては固有ベクトルがすべて求まっているとしよう．もし，$\hat{V}$ が $\hat{H}_0$ に比べて十分小さければ，$\hat{H}$ の固有ベクトルや固有値は，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルや固有値を少し修正してやれば得られるだろう．このようにみたとき，全ハミルトニアン $\hat{H}$ は，ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に摂動 $\hat{V}$ が加わったものであるといえる．

もちろん，原理的には，全ハミルトニアン $\hat{H}$ を $\hat{H}_0$ と $\hat{V}$ に分解する方法は無数にある．しかし，実際上は，$\hat{H}_0$ が厳密に解けて，しかも $\hat{V}$ の効果は小さいようにするのが望ましいのであり，問題に応じて分け方をうまく選んでやる必要がある．この節では，そのようにうまく分けることができたとして，全ハミルトニアンの固有ベクトルと固有値が，どのようにして $\hat{H}_0$ の固有ベクトルと固有値を使って表せるかを議論しよう．

摂動論が一種のべき展開であることをあからさまに示すために，λ という変数を導入して，全ハミルトニアン $\hat{H}$ を，

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V} \tag{9.1}$$

と書こう（これは V についての展開のべきを見やすくするためであって，実際は $\lambda=1$ とおくのである）．ここで，$\hat{H}_0$ は完全に対角化されていて，エネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ に対応する規格化された固有ベクトルを $|\varphi_n^{(0)}\rangle$　($n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$) としよう．

$$\begin{aligned}&\hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \qquad (n=1,\ 2,\ \cdots)\\&\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_m^{(0)}\rangle=\delta_{nm}\end{aligned} \tag{9.2}$$

この節では，まず，$\hat{H}_0$ に縮退がない場合を考えよう．すなわち，$E_n^{(0)}$ ($n=1,\ 2,\ \cdots$) はすべてたがいに異なるものとする．縮退がある場合も，実際の応用上は重要であり，次節で議論することにする．

ところで，λ を 0 とおくと明らかに $\hat{H}=\hat{H}_0$ であるから，λ が十分小さければ，$\hat{H}$ の固有値や固有ベクトルは，$\hat{H}_0$ のものと少ししか違わないだろう．すなわち，$\hat{H}$ の固有値 E_n に対する固有ベクトルを $|\varphi_n\rangle$ と書くと，

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle=E_n|\varphi_n\rangle \qquad (n=1,\ 2,\ \cdots) \tag{9.3}$$

であるが，E_n，$|\varphi_n\rangle$ はそれぞれ，

$$E_n=E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+\cdots \tag{9.4a}$$

$$|\varphi_n\rangle=|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots \tag{9.4b}$$

の形に λ のべき級数として表せると考えるのが自然であろう．そうすると，固有値

方程式(9.3)は,

$$(\hat{H}_0+\lambda\hat{V})(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots)$$
$$=(E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2 E_n^{(2)}+\cdots)(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda|\varphi_n^{(1)}\rangle+\lambda^2|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots) \tag{9.5}$$

となるが，両辺から λ のべきの等しい部分をとり出すとつぎのようになる．

$$\lambda^0 : \hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$\lambda^1 : \hat{H}_0|\varphi_n^{(1)}\rangle+\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(1)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$\lambda^2 : \hat{H}_0|\varphi_n^{(2)}\rangle+\hat{V}|\varphi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(1)}|\varphi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$\vdots \tag{9.6}$$

このうちの第1式は，(9.3)で $\lambda=0$ とおいたものであるから，当然(9.2)に帰着するはずであり，実際そうなっている．第2式以下をそれぞれ適当に移項して，

$$\lambda^1 : (E_n^{(0)}-\hat{H}_0)|\varphi_n^{(1)}\rangle=(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.7a}$$
$$\lambda^2 : (E_n^{(0)}-\hat{H}_0)|\varphi_n^{(2)}\rangle=(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(1)}\rangle-E_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.7b}$$
$$\vdots$$

の形に書こう．まず，λ について1次，すなわち1次摂動の効果を調べるために，(9.7a)の両辺を完全系 $\{|\varphi_m^{(0)}\rangle\}$ に関する成分で表そう．すなわち，$\langle\varphi_m^{(0)}|$ と(9.7a)の両辺の内積をとる．ここで，

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{H}_0=E_m^{(0)}\langle\varphi_m^{(0)}|$$
$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle=\delta_{mn} \tag{9.8}$$

に注意すると，(9.7a)は,

$$(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle=\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle-E_n^{(1)}\delta_{mn} \tag{9.9}$$

と等価であることがわかる．まず，この式で，$m=n$ とおいてみると，左辺はゼロになり，$E_n^{(1)}$ を与える式を得る．

$$E_n^{(1)}=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.10}$$

つぎに $m\neq n$ の場合は，$\hat{H}_0$ に縮退がないという仮定から，左辺の第一因子 $E_n^{(0)}-E_m^{(0)}$ はゼロでないので，両辺をこれでわることができて，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ を完全系 $\{|\varphi_m^{(0)}\rangle\}$ で展開したときの展開係数を与える式が得られる．

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle=\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \quad (m\neq n) \tag{9.11}$$

けっきょく，摂動の1次までででは，エネルギー固有値のずれは(9.10)で与えられ，波動関数のずれは(9.11)で与えられることがわかった．ところで，(9.11)からは，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ が完全には決まっていないことに注意しよう．すなわち，(9.11)をみたすような $|\varphi_n^{(1)}\rangle$ は一般に,

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle=\sum_{m(\neq n)}|\varphi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+c_n^{(1)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.12}$$

であり，ここで $c_n^{(1)}$ は任意定数でよい．これは，(9.11)が $|\varphi_n^{(1)}\rangle$ の完全系 $\{|\varphi_m^{(0)}\rangle\}$ に関する成分のうち，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$ の成分については何もいっていないからである．このように，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ に不定性が残るのは，決して不思議なことではなくて，固有ベクトルには常に定数倍の不定性があることを思い出せば，むしろ当然である．すなわち，われわれは，固有値方程式(9.3)の解を，

$$|\varphi_n\rangle=|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda|\varphi_n^{(1)}\rangle+O(\lambda^2) \tag{9.13}$$

の形に展開したわけであるが，これに定数 $(1+c\lambda)$ をかけたもの $(1+c\lambda)|\varphi_n\rangle$ ももちろん固有ベクトルである．(9.13)より，

$$\begin{aligned}(1+c\lambda)|\varphi_n\rangle&=(1+c\lambda)(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda|\varphi_n^{(1)}\rangle)+O(\lambda^2)\\&=|\varphi_n^{(0)}\rangle+\lambda(|\varphi_n^{(1)}\rangle+c|\varphi_n^{(0)}\rangle)+O(\lambda^2)\end{aligned} \tag{9.14}$$

であるが，この右辺を(9.13)と比べてみると，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ には $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ の定数倍を加える不定性が残っていることがわかる．

どのような場合に，摂動論がよい近似になっているかを考えるために，波動関数に対する1次摂動の表式(9.12)をながめてみよう．この式は，摂動の0次で $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ であった波動関数が，摂動 $\hat{V}$ によって少しずれて，他の成分 $|\varphi_m^{(0)}\rangle$ $(m\neq n)$ が，

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle=\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \tag{9.11}$$

だけ混ざってくることを示している．この形をみると，分母に現れているような $\hat{H}_0$ の固有値の差 $E_n^{(0)}-E_m^{(0)}$ に比べて，摂動 $\hat{V}$ の行列要素が小さければ，摂動によるずれは小さいということ，すなわち摂動論がよい近似であることがわかる．

ところで，エネルギー固有値のずれに対する1次摂動の式(9.10)は，つぎのように読みかえることができる．

$$\begin{aligned}E_n&=E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+O(\lambda^2)\\&=\langle\varphi_n^{(0)}|(\hat{H}_0+\lambda\hat{V})|\varphi_n^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\\&=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{H}|\varphi_n^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\end{aligned} \tag{9.15}$$

すなわち，摂動の1次までの精度では，波動関数の変化を忘れてしまって，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルで全ハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値をとることにより，対応するエネルギー固有値が得られる．この事情は，つぎの例題のように考えれば，もう少しわかりやすくなるだろう．

例題1　(Hellmann-Feynman の定理)

パラメーター λ になめらかに依存するハミルトニアン $\hat{H}(\lambda)$ があるとする．その

固有値 $E(\lambda)$ に対応する規格化された固有ベクトルを $|\varphi(\lambda)\rangle$ とし，$E(\lambda)$ も $|\varphi(\lambda)\rangle$ も λ の関数としてなめらかであるとする．このとき，

$$\frac{d}{d\lambda}E(\lambda)=\langle\varphi(\lambda)|\left(\frac{d}{d\lambda}\hat{H}(\lambda)\right)|\varphi(\lambda)\rangle$$

であることを示せ．

解　$\hat{H}(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle=E(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$ の両辺を λ で微分すると，

$$\left(\frac{d}{d\lambda}\hat{H}(\lambda)\right)|\varphi(\lambda)\rangle+\hat{H}(\lambda)\frac{d}{d\lambda}|\varphi(\lambda)\rangle$$
$$=\left(\frac{d}{d\lambda}E(\lambda)\right)|\varphi(\lambda)\rangle+E(\lambda)\frac{d}{d\lambda}|\varphi(\lambda)\rangle$$

を得る．この式の両辺と $\langle\varphi(\lambda)|$ の内積をとると，ほしい式が得られる．ここで，$\frac{d}{d\lambda}|\varphi(\lambda)\rangle$ を含む項，すなわち，両辺の第2項どうしは，$\langle\varphi(\lambda)|\hat{H}(\lambda)=E(\lambda)\langle\varphi(\lambda)|$ により相殺することに注意しよう．　■

つぎに，摂動の2次の効果を考えよう．1次のときと同様に，今度は，(9.7b)の両辺と $\langle\varphi_m^{(0)}|$ の内積をとろう．そうすると，

$$(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)}\rangle=\langle\varphi_m^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(1)}\rangle-E_n^{(2)}\delta_{nm} \tag{9.16}$$

が得られるが，まず，$m=n$ としてみると，左辺はゼロになり，$E_n^{(2)}$ を与える式が得られる．

$$E_n^{(2)}=\langle\varphi_n^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(1)}\rangle \tag{9.17}$$

一方，$m\neq n$ の場合は，$E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\neq 0$ であるから，両辺をそれでわることによって，$|\varphi_n^{(2)}\rangle$ の完全系 $\{|\varphi_m^{(0)}\rangle\}$ に関する成分を与える式が得られる．

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(2)}\rangle=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\langle\varphi_m^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(1)}\rangle\quad(m\neq n) \tag{9.18}$$

これらの式に，$|\varphi_n^{(1)}\rangle$ の表示式(9.12)を代入して少し計算すると，$E_n^{(2)}$ および $|\varphi_n^{(2)}\rangle$ を与える式として，

$$E_n^{(2)}=\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \tag{9.19}$$

$$\begin{aligned}|\varphi_n^{(2)}\rangle=\sum_{m(\neq n)}|\varphi_m^{(0)}\rangle\Bigg\{&\sum_{l(\neq n)}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_l^{(0)}\rangle\langle\varphi_l^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})}\\&-\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}\\&+\frac{c_n^{(1)}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\Bigg\}+c_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{9.20}$$

を得る．ここで(9.20)の右辺に任意定数 $c_n^{(2)}$ が現れたのは(9.12)に $c_n^{(1)}$ が現れたのと同様の理由であり，(9.18)は $m=n$ に対しては何もいっていないからである．

例題 2 (9.19)と(9.20)を導け.

解 (1) (9.17)に(9.12)を代入すると,

$$E_n^{(2)}=\langle\varphi_n^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})\left(\sum_{m(\neq n)}|\varphi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+c_n^{(1)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\right)$$

$$=\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+c_n^{(1)}\langle\varphi_n^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(0)}\rangle$$

となるが,第2項は,$E_n^{(1)}$ の表式(9.10)よりゼロであり,(9.19)が得られる.

(2) (9.18)の右辺の第2因子に(9.12)を代入し,$m\neq n$ に注意して計算すると,

$$\langle\varphi_m^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})|\varphi_n^{(1)}\rangle$$

$$=\langle\varphi_m^{(0)}|(\hat{V}-E_n^{(1)})\left(\sum_{l(\neq n)}|\varphi_l^{(0)}\rangle\frac{\langle\varphi_l^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}+c_n^{(1)}|\varphi_n^{(0)}\rangle\right)$$

$$=\sum_{l(\neq n)}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_l^{(0)}\rangle\langle\varphi_l^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}$$

$$-E_n^{(1)}\frac{\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+c_n^{(1)}\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$

となるが,この右辺第2項の $E_n^{(1)}$ にその表式(9.10)を代入すると,(9.20)が得られることは明らかであろう. ■

ところで,エネルギー固有値の2次摂動の式(9.19)は,

$$E_n^{(2)}=\sum_{m(\neq n)}\frac{|\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}|\varphi_m^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \tag{9.21}$$

とも書けることに注意しよう.このように書くと,基底状態のエネルギー固有値に対する2次の摂動は必ず負かゼロであることが明らかになる.それは,n が基底状態であるとすると,右辺の分母はどんな m に対しても負の量であり,一方,分子は常に正かゼロであるからである.これは,もし基底状態に対して,エネルギー固有値の1次摂動がゼロならば,2次摂動の効果によって,基底状態のエネルギーは必ず小さくなることを示している.このような事情は,実際,現実の系に対してもしばしば起きており,その1つの例が,以下に示す van der Waals 力である.

例題 3 基底状態にある2つの中性原子が十分に離れているとき,その間に働く力の距離に対する依存性を調べよ.

解 2つの原子が十分に離れているときには,その間の力はそれぞれの原子のもつ電気双極子間の力として記述できる.すなわち,全ハミルトニアン $\hat{H}$ は,

$$\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2+\frac{1}{R^3}\left(\hat{\boldsymbol{d}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{d}}_2-3\frac{(\hat{\boldsymbol{d}}_1\cdot\boldsymbol{R})(\hat{\boldsymbol{d}}_2\cdot\boldsymbol{R})}{R^2}\right)$$

と書ける.ここで,$\hat{H}_1$, $\hat{H}_2$ は原子1と原子2がそれぞれ単独にいるときのハミルトニアンであり,$\hat{\boldsymbol{d}}_1$, $\hat{\boldsymbol{d}}_2$ は原子1と原子2の電気双極子モーメントの演算子である.

また，$\boldsymbol{R}$ は原子１と原子２の位置ベクトルの差であり，R はその大きさである．ここで，電気双極子の間のポテンシャルは $\dfrac{1}{R^3}$ に比例していることに注意しよう．つぎにハミルトニアン $\hat{H}$ をつぎのように $\hat{H}_0$ と $\hat{V}$ に分解して摂動論を適用しよう．

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$\hat{V} = \frac{1}{R^3}\left(\hat{\boldsymbol{d}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{d}}_2 - 3\frac{(\hat{\boldsymbol{d}}_1 \cdot \boldsymbol{R})(\hat{\boldsymbol{d}}_2 \cdot \boldsymbol{R})}{R^2}\right)$$

原子１と原子２の基底状態をそれぞれ $|\varphi^{(0)};1\rangle$, $|\varphi^{(0)};2\rangle$ とし，それらは縮退していないとすると，$|\Phi^{(0)}\rangle = |\varphi^{(0)};1\rangle|\varphi^{(0)};2\rangle$ は $\hat{H}_0$ の縮退していない基底状態を与える．ところで，この状態に対するエネルギー固有値の１次摂動はゼロであることがつぎの計算からわかる．

$$\langle \Phi^{(0)} | \hat{V} | \Phi^{(0)} \rangle = \frac{1}{R^3}\left(\langle \hat{\boldsymbol{d}}_1 \rangle \cdot \langle \hat{\boldsymbol{d}}_2 \rangle - 3\frac{(\langle \hat{\boldsymbol{d}}_1 \rangle \cdot \boldsymbol{R})(\langle \hat{\boldsymbol{d}}_2 \rangle \cdot \boldsymbol{R})}{R^2}\right)$$

ここで，$\langle \hat{\boldsymbol{d}}_1 \rangle = \langle \varphi^{(0)};1 | \hat{\boldsymbol{d}}_1 | \varphi^{(0)};1 \rangle$, $\langle \hat{\boldsymbol{d}}_2 \rangle = \langle \varphi^{(0)};2 | \hat{\boldsymbol{d}}_2 | \varphi^{(0)};2 \rangle$ であるが，これらは基底状態の電気双極子モーメントであり，時間反転などの議論により，通常ゼロとしてよい．一方，２次摂動の効果は(9.21)のところで議論したように，常に負の値を与えるが，それは $\hat{V}$ の行列要素の２乗に比例しているから，けっきょく $-\dfrac{1}{R^6}$ に比例することがわかる．この議論は，原子に限らず分子にも通用するはずであるから，けっきょく，中性の原子・分子の基底状態の間には，十分遠方ではポテンシャルが $-\dfrac{1}{R^6}$ に比例するような引力が働くことがわかる．これが，van der Waals 力とよばれているものである．　▮

［問題１］　(9.12)および(9.20)に現れた不定性 $c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$ を固定するために，(9.4b)の $|\varphi_n\rangle$ が λ の各次数で１に規格化されているとしよう．このためには，$c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$ はどのようにとればよいか．

［解］　$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1$ に(9.4b)を代入すると，

$$\begin{aligned}&\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(0)} \rangle + \lambda(\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle + \langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(0)} \rangle)\\&\qquad + \lambda^2(\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(2)} \rangle + \langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(1)} \rangle + \langle \varphi_n^{(2)} | \varphi_n^{(0)} \rangle)\\&\qquad + \cdots\cdots\\&= 1\end{aligned}$$

となる．これが λ の各次数に対して成り立つためには，

$$\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle + \langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(0)} \rangle = 0 \qquad ⓐ$$

$$\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(2)} \rangle + \langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(1)} \rangle + \langle \varphi_n^{(2)} | \varphi_n^{(0)} \rangle = 0 \qquad ⓑ$$

……

であればよい．ⓐに(9.12)を代入して，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$ $(n=1,\ 2,\ \cdots)$ の直交性を思い出すと，

$$c_n^{(1)}+c_n^{(1)*}=0 \qquad ⓒ$$

となる．つぎに，ⓑに(9.12)と(9.20)を代入すると，

$$c_n^{(2)}+c_n^{(2)*}+c_n^{(1)}c_n^{(1)*}+\sum_{m(\neq n)}\frac{|\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle|^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}=0 \qquad ⓓ$$

となる．とくに，ⓒをみたすものとして，$c_n^{(1)}=0$ をとることができ，このときⓓをみたすものとして，

$$c_n^{(2)}=-\frac{1}{2}\sum_{m(\neq n)}\frac{|\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle|^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}$$

がとれる． ∎

[問題 2] $|\varphi_n^{(1)}\rangle$, $|\varphi_n^{(2)}\rangle$, … の不定性 $c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$, … は演算子の期待値 $\langle\hat{O}\rangle=\dfrac{\langle\varphi_n|\hat{O}|\varphi_n\rangle}{\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle}$ には現れないことを摂動の2次までで具体的にチェックせよ．

[解] (9.12)および(9.20)で $c_n^{(1)}=0$, $c_n^{(2)}=0$ とおいたものをそれぞれ，$|\varphi_n^{(1)};c=0\rangle$, $|\varphi_n^{(2)};c=0\rangle$ と書くことにすると，(9.12), (9.20)は，

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle=|\varphi_n^{(1)};c=0\rangle+c_n^{(1)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$|\varphi_n^{(2)}\rangle=|\varphi_n^{(2)};c=0\rangle+c_n^{(1)}|\varphi_n^{(1)};c=0\rangle+c_n^{(2)}|\varphi_n^{(0)}\rangle$$

と書ける．$c_n^{(1)}$ はオーダー $O(\hat{V})$ の量であり，$c_n^{(2)}$ はオーダー $O(\hat{V}^2)$ の量であるから，上の2式より

$$\begin{aligned}|\varphi_n\rangle&=|\varphi_n^{(0)}\rangle+|\varphi_n^{(1)}\rangle+|\varphi_n^{(2)}\rangle+\cdots\\&=(1+c_n^{(1)}+c_n^{(2)}+\cdots)(|\varphi_n^{(0)}\rangle+|\varphi_n^{(1)};c=0\rangle+|\varphi_n^{(2)};c=0\rangle+\cdots)\end{aligned}$$

と書けることがわかる．確かに，$c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$, …の不定性は，波動関数 $|\varphi_n\rangle$ の全体にかかる定数の不定性になっており，演算子の期待値を $\hat{V}$ のべきで展開したときには，不定性は現れない． ∎

[問題 3] 状態 $|\varphi_n\rangle$ のなかに，状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ を見い出す確率を求めよ．

[解] $|\varphi_n\rangle$ は規格化されているとすると，求める確率は，$|\langle\varphi_n^{(0)}|\varphi_n\rangle|^2$ である．[問題 1] の結果を使うと，これは，

$$\begin{aligned}&\left|1-\frac{1}{2}\sum_{m(\neq n)}\frac{|\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle|^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}+O(\hat{V}^3)\right|^2\\&=1-\sum_{m(\neq n)}\frac{|\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}|\varphi_n^{(0)}\rangle|^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}+O(\hat{V}^3)\end{aligned}$$

に等しい． ∎

9.2 時間によらない摂動論 II ― 縮退のある場合

前節では，$\hat{H}_0$ に縮退がない場合を議論したが，この節では，$\hat{H}_0$ に縮退がある場合を考える．$\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に対応する固有ベクトルが N_n 個あるとし，それらを $|\varphi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ $(\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ N_n)$ と書こう．すなわち，

$$\hat{H}_0|\varphi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \quad (\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ N_n) \tag{9.22}$$

であり，また，$\{|\varphi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle\}$ は正規直交基底になっているとしよう．

$$\langle\varphi_{m,\beta}^{(0)}|\varphi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle=\delta_{m,n}\,\delta_{\beta,\alpha} \tag{9.23}$$

ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に小さな摂動 $\lambda\hat{V}$ が加わったときに，全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ の固有値と固有ベクトルがどのようなものになるかを求めるのが目的である．前節と同様に，摂動 $\lambda\hat{V}$ が十分に小さければ，$\hat{H}$ のエネルギー固有値は，$\hat{H}_0$ のエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ に十分近いと考えられる．しかし，$\hat{H}_0$ のもっていた縮退は，摂動の影響によってとけることがあることに注意しなければいけない(図9.1)．

縮退が摂動によってとけるようすを理解するために，つぎのような簡単な例を考えてみよう．

$$\hat{H}_0=\begin{pmatrix} E_0 & & \\ & E_0 & \\ & & E_0 \end{pmatrix},\quad \hat{V}=\begin{pmatrix} v & & \\ & v & \\ & & 2v \end{pmatrix} \tag{9.24}$$

この場合，$\hat{H}_0$ の固有値は E_0 であり，3重に縮退している．一方，全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ の固有値は，$E_0+\lambda v$ と $E_0+2\lambda v$ であり，それぞれ2重および1重に縮退している．すなわち，エネルギー準位は，摂動 $\lambda\hat{V}$ が加わる前は3重に縮退していたが，摂動によって部分的に縮退がとけて，2重と1重に分裂したといえる．同様に，

$$\hat{H}_0=\begin{pmatrix} E_0 & & \\ & E_0 & \\ & & E_0 \end{pmatrix},\quad \hat{V}=\begin{pmatrix} v & & \\ & 2v & \\ & & 3v \end{pmatrix} \tag{9.25}$$

のような例を考えると，こんどは，摂動によって縮退が完全にとけることは明らかであろう．もちろん，摂動によって縮退がとけない場合もありうる．

縮退がとけるときに，固有ベクトルがどのようにふるまうかを考えるために，ふたたび上記(9.24)の例を調べよう．摂動が加わる前のハミルトニアン $\hat{H}_0$ では，固有値は3重に縮退しており，固有ベクトルとしては，一次独立な3つのものとして何をもってきてもよい．一方，摂動のあるハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ では，2重に縮退している固有値 $E_0+\lambda v$ に対応する固有ベクトルは，

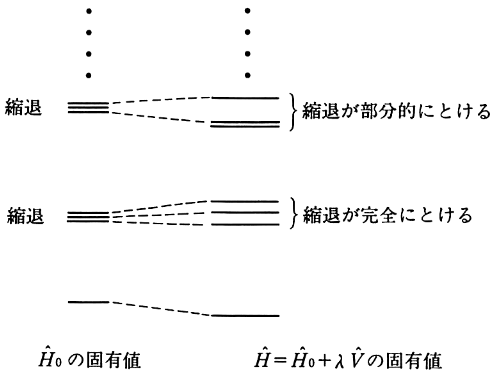


図 9.1　摂動によって縮退がとける例

$$a\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \tag{9.26}$$

の形のものであり，縮退していない固有値 $E_0+2\lambda v$ に対応する固有ベクトルは，

$$c\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \tag{9.27}$$

である．ここで少し見方を変えて，λ に依存する全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ で，$\lambda\to0$ の極限が $\hat{H}_0$ であると考えてみる．この極限で，(9.26)の形の 2 つの固有ベクトルと(9.27)の形の 1 つの固有ベクトルは，同じ固有値 E_0 をもつようになる．しかし，固有ベクトルじしんは $\lambda\to0$ の極限をとっても，(9.26)の形のものは依然として(9.26)の形であり，(9.27)の形のものも依然として(9.27)の形である．いいかえると，摂動展開を行うためには，摂動のゼロ次のレベルで，縮退している固有ベクトルの適当な線型結合をとってやる必要がある．

以上の例で，摂動によって縮退がとけるようすがだいたい把握できたと思うので，(9.22)，(9.23)によって与えられる一般的な場合に議論を進めよう．全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ の固有値を $E_{n,\alpha}(\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ N_n)$ とし，固有ベクトルを $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ としよう．

$$\hat{H}\,|\varphi_{n,\alpha}\rangle=E_{n,\alpha}|\varphi_{n,\alpha}\rangle \tag{9.28}$$

前節と同様に，$E_{n,\alpha}$ および $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ を λ のべき級数として表す．

$$E_{n,\alpha}=E_n^{(0)}+\lambda E_{n,\alpha}^{(1)}+\lambda^2 E_{n,\alpha}^{(2)}+\cdots \tag{9.29a}$$

$$|\varphi_{n,\alpha}\rangle=\sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}{}^{\beta}\,|\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle+\lambda\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle+\lambda^2\,|\varphi_{n,\alpha}^{(2)}\rangle+\cdots \tag{9.29b}$$

ここで，(9.29b)の右辺の第1項，すなわち，摂動のゼロ次で，縮退している状態 $|\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle$ の線型結合をとっているのは，上の例で説明した理由による．(9.29a)，(9.29b)を(9.28)に代入して，λ の各次数を等しいとおくと，

$$\lambda^1:(E_n^{(0)}-\hat{H}_0)\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle=(\hat{V}-E_{n,\alpha}^{(1)})\sum_{\beta} a_{n,\alpha}{}^{\beta}\,|\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle \tag{9.30a}$$

$$\lambda^2:(E_n^{(0)}-\hat{H}_0)\,|\varphi_{n,\alpha}^{(2)}\rangle=(\hat{V}-E_{n,\alpha}^{(1)})\,|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle-E_{n,\alpha}^{(2)}\sum_{\beta} a_{n,\alpha}{}^{\beta}\,|\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle \tag{9.30b}$$

$$\vdots$$

が得られる．1次摂動の効果を考えるために，(9.30a)の両辺と $\langle\varphi_{m,\beta}^{(0)}|$ との内積をとる．

$$\begin{aligned}&(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\langle\varphi_{m,\beta}^{(0)}\,|\,\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle\\&=\sum_{\gamma} a_{n,\alpha}{}^{\gamma}(\langle\varphi_{m,\beta}^{(0)}\,|\,\hat{V}\,|\,\varphi_{n,\gamma}^{(0)}\rangle-E_{n,\alpha}^{(1)}\delta_{m,n}\delta_{\beta,\gamma})\end{aligned} \tag{9.31}$$

この式で $m=n$ とおくと，左辺はゼロであるから，

$$\sum_{\gamma=1}^{N_n}\langle\varphi_{n,\beta}^{(0)}\,|\,\hat{V}\,|\,\varphi_{n,\gamma}^{(0)}\rangle a_{n,\alpha}{}^{\gamma}=E_{n,\alpha}^{(1)}a_{n,\alpha}{}^{\beta} \tag{9.32}$$

が得られる．これは，$a_{n,\alpha}{}^{\beta}$ の上つきの添字 β を N_n 次元ベクトル $\boldsymbol{a}_{n,\alpha}$ の成分を表す添字とみなし，$\langle\varphi_{n,\beta}^{(0)}|\,\hat{V}\,|\varphi_{n,\gamma}^{(0)}\rangle$ を $N_n\times N_n$ 行列 V_n の $\beta\gamma$ 成分とみなすと，

$$V_n\boldsymbol{a}_{n,\alpha}=E_{n,\alpha}^{(1)}\boldsymbol{a}_{n,\alpha} \tag{9.33}$$

の形の固有値方程式であることがわかる．すなわち，摂動のゼロ次までの波動関数と，摂動の1次までのエネルギー固有値は，行列 V_n を対角化することにより得られる．V_n がすべて異なる固有値をもてば，縮退は1次摂動で完全にとけるが，摂動の1次では，縮退が完全にはとけないこともあることに注意しよう．(9.32)の意味を明らかにするために，その両辺に $|\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle$ をかけ，β について和をとってみる．

$$\begin{aligned}&\sum_{\beta=1}^{N_n}|\,\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{n,\beta}^{(0)}\,|\,\hat{V}\sum_{\gamma=1}^{N_n}|\,\varphi_{n,\gamma}^{(0)}\rangle a_{n,\alpha}{}^{\gamma}\\&=E_{n,\alpha}^{(1)}\sum_{\beta=1}^{N_n}|\,\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle a_{n,\alpha}{}^{\beta}\end{aligned} \tag{9.34}$$

ここで，$\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に対応する固有空間への射影子 $\hat{\phi}_n$ を導入し，

$$\hat{\phi}_n=\sum_{\beta=1}^{N_n}|\,\varphi_{n,\beta}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{n,\beta}^{(0)}\,| \tag{9.35}$$

ゼロ次の固有ベクトル $\sum_{\gamma=1}^{N_n}|\,\varphi_{n,\gamma}^{(0)}\rangle a_{n,\alpha}{}^{\gamma}$ を $|\,\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ と書くことにすると，(9.34)は，

$$\hat{\phi}_n\hat{V}|\,\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle=E_{n,\alpha}^{(1)}\,|\,\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \tag{9.36}$$

と書ける．さらに，$\hat{\phi}_n|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle=|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle$ に注意すると，上式は，

$$(\hat{\phi}_n\hat{V}\hat{\phi}_n)|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle=E^{(1)}_{n,\alpha}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle \tag{9.37}$$

となる．この式は，摂動のゼロ次の固有ベクトル $|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle$ と摂動の1次のエネルギー $E^{(1)}_{n,\alpha}$ は，$\hat{V}$ を $\hat{H}_0$ の固有値 $E^{(0)}_n$ の固有空間へ射影したもの $\hat{\phi}_n\hat{V}\hat{\phi}_n$ を対角化することによって得られることを示している．

つぎに，(9.31)で $m\neq n$ の場合は，両辺を $E^{(0)}_n-E^{(0)}_m$ でわると，

$$\langle\varphi^{(0)}_{m,\beta}|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle=\frac{1}{E^{(0)}_n-E^{(0)}_m}\langle\varphi^{(0)}_{m,\beta}|\hat{V}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle \qquad (m\neq n) \tag{9.38}$$

となり，これから，固有ベクトルの摂動によるずれの1次の項は，

$$|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle=\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \beta}}\frac{|\varphi^{(0)}_{m,\beta}\rangle\langle\varphi^{(0)}_{m,\beta}|\hat{V}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle}{E^{(0)}_n-E^{(0)}_m}+\sum_{\beta}c^{(1)}_{n,\alpha}{}^{\beta}|\xi^{(0)}_{n,\beta}\rangle \tag{9.39}$$

で与えられることがわかる．ここで，$c^{(1)}_{n,\alpha}{}^{\beta}$ は以下のようにして決まる定数である．

摂動の2次の効果を調べるために，(9.30b)を，

$$(E^{(0)}_n-\hat{H}_0)|\varphi^{(2)}_{n,\alpha}\rangle=(\hat{V}-E^{(1)}_{n,\alpha})|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle-E^{(2)}_{n,\alpha}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle \tag{9.40}$$

と書き，両辺と $\langle\xi^{(0)}_{n,\beta}|$ の内積をとってみる．左辺はゼロとなり，右辺では，

$$\begin{aligned}&\langle\xi^{(0)}_{n,\beta}|(\hat{V}-E^{(1)}_{n,\alpha})|\xi^{(0)}_{n,\gamma}\rangle\\&=\langle\xi^{(0)}_{n,\beta}|(\hat{\phi}_n\hat{V}\hat{\phi}_n-E^{(1)}_{n,\alpha})|\xi^{(0)}_{n,\gamma}\rangle\\&=(E^{(1)}_{n,\beta}-E^{(1)}_{n,\alpha})\delta_{\beta\gamma}\end{aligned} \tag{9.41}$$

に注意すると，

$$\begin{aligned}&\langle\xi^{(0)}_{n,\beta}|\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \gamma}}\hat{V}\frac{|\varphi^{(0)}_{m,\gamma}\rangle\langle\varphi^{(0)}_{m,\gamma}|}{E^{(0)}_n-E^{(0)}_m}\hat{V}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle\\&+(E^{(1)}_{n,\beta}-E^{(1)}_{n,\alpha})c^{(1)}_{n,\alpha}{}^{\beta}-E^{(2)}_{n,\alpha}\delta_{\alpha\beta}=0\end{aligned} \tag{9.42}$$

が得られる．ここで，$|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle$ は正規直交であるとした．(9.42)の内容を考えるために，まず，縮退は摂動の1次で完全にとける，すなわち，$E^{(1)}_{n,\alpha}$ $(\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ N_n)$ はすべて異なると仮定しよう．この仮定のもとで，(9.42)の $\beta=\alpha$ の場合と $\beta\neq\alpha$ の場合はそれぞれ，以下のように書きかえられる．

$$E^{(2)}_{n,\alpha}=\langle\xi^{(0)}_{n,\alpha}|\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \beta}}\hat{V}\frac{|\varphi^{(0)}_{m,\beta}\rangle\langle\varphi^{(0)}_{m,\beta}|}{E^{(0)}_n-E^{(0)}_m}\hat{V}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle \tag{9.43a}$$

$$c^{(1)}_{n,\alpha}{}^{\beta}=\frac{1}{E^{(1)}_{n,\alpha}-E^{(1)}_{n,\beta}}\langle\xi^{(0)}_{n,\beta}|\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \gamma}}\hat{V}\frac{|\varphi^{(0)}_{m,\gamma}\rangle\langle\varphi^{(0)}_{m,\gamma}|}{E^{(0)}_n-E^{(0)}_m}\hat{V}|\xi^{(0)}_{n,\alpha}\rangle \qquad (\beta\neq\alpha) \tag{9.43b}$$

また，(9.42)は $c^{(1)}_{n,\alpha}{}^{\alpha}$ に対しては何も制限していないことに注意しよう．(9.43b)を(9.39)に代入すると，$|\varphi^{(1)}_{n,\alpha}\rangle$ に対する最終的な表式が得られる．

$$|\varphi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle=\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \beta}}\frac{|\varphi_{m,\beta}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{m,\beta}^{(0)}|\hat{V}|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$
$$+\sum_{\beta(\neq\alpha)}\frac{|\xi_{n,\beta}^{(0)}\rangle\langle\xi_{n,\beta}^{(0)}|}{E_{n,\alpha}^{(1)}-E_{n,\beta}^{(1)}}\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \gamma}}\hat{V}\frac{|\varphi_{m,\gamma}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{m,\gamma}^{(0)}|}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\hat{V}|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \tag{9.44}$$
$$+c_{n,\alpha}^{(1)}|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$$

ここで，$c_{n,\alpha}^{(1)}=c_{n,\alpha}^{(1)\alpha}$ は任意の定数であり，前節の場合と同様に，波動関数 $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ の全体にかかる定数の不定性に対応している．

摂動の1次では，縮退が完全にとけない場合は，上の議論は使えなくなる．それは，(9.43b)の右辺の第1因子 $\dfrac{1}{E_{n,\alpha}^{(1)}-E_{n,\beta}^{(1)}}$ の分母がゼロになってしまうからである．この場合は，(9.42)に戻って考えればよい．簡単のために，1次摂動では，縮退がまったくとけない場合，すなわち，$E_{n,\alpha}^{(1)}$ ($\alpha=1, 2, \cdots, N_n$) がすべて等しい場合を考えよう．この場合，(9.42)の左辺の第2項は恒等的にゼロとなり，

$$\langle\xi_{n,\beta}^{(0)}|\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \gamma}}\hat{V}\frac{|\varphi_{m,\gamma}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{m,\gamma}^{(0)}|}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\hat{V}|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle=E_{n,\alpha}^{(2)}\delta_{\alpha\beta} \tag{9.45}$$

が得られる．ところで，1次摂動で縮退がまったくとけないということは，$|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ を決める固有値方程式(9.37)が完全に縮退しているということであり，$|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ は $\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ の固有空間の基底であれば何でもよかったわけである．一方，(9.45)は勝手な $|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ をもってきたのでは，成り立つとは限らない．なぜならば，右辺は $\delta_{\alpha\beta}$ に比例しているのに，左辺は勝手な $|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ に対しては $\delta_{\alpha\beta}$ に比例するとは限らないからである．これは，1次摂動ではまだとけなかった縮退が，2次摂動でとけることがあることを示している．(9.45)が一種の固有値方程式であることは，両辺に $|\xi_{n,\beta}^{(0)}\rangle$ をかけて β について加えると明らかになる．ここで，

$$\sum_{\beta}|\xi_{n,\beta}^{(0)}\rangle\langle\xi_{n,\beta}^{(0)}|=\hat{\phi}_n \tag{9.46}$$

$$\hat{\phi}_n|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle=|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \tag{9.47}$$

を思い出すと，(9.45)はけっきょく，

$$\left(\hat{\phi}_n\sum_{\substack{m(\neq n)\\ \gamma}}\hat{V}\frac{|\varphi_{m,\gamma}^{(0)}\rangle\langle\varphi_{m,\gamma}^{(0)}|}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\hat{V}\hat{\phi}_n\right)|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$$
$$=E_{n,\alpha}^{(2)}|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \tag{9.48}$$

となり，$|\xi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ を決める固有値方程式になっている．この方程式は，(9.37)と似た形をしている．(9.37)が完全に縮退しているとき，すなわち1次摂動で縮退がとけないときは，(9.48)を解くことによって，2次摂動による縮退の分裂が与えられる．

9.3 相互作用表示

前の 2 つの節では，全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$ を対角化して，固有値と固有関数を求めることを議論したが，以下では，時間を含む Schrödinger 方程式を考え，波動関数の時間発展が摂動によってどのように変化するかを調べよう．Schrödinger 表示では系の時間発展は，Schrödinger 方程式で記述される．

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{9.49}$$

ここで，ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ は時間に依存してもよいとし，さらに，

$$\hat{H}(t)=\hat{H}_0+\hat{V}(t) \tag{9.50}$$

のように分解できているとする．簡単のため，$\hat{H}_0$ は時間には依存しないとしよう．また，前の 2 つの節と同様に，$\hat{H}_0$ は厳密に対角化できており，$\hat{V}(t)$ の効果は $\hat{H}_0$ に比べて小さいとする．$\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に対応する固有関数を $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ とすると，もし，$\hat{V}(t)=0$ ならば(9.49)は簡単に積分できて，

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.51}$$

と書ける．すなわち，$\hat{V}(t)=0$ ならば各 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ は定常状態であり，時間発展は単に $\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)$ という因子によって表される．いま，ハミルトニアンに摂動 $\hat{V}(t)$ がつけ加わったとしても，(9.49)の解は各時刻でやはり，(9.51)のように完全系 $\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\}$ $(n=1,2,\cdots)$ で展開できるが，c_n はもはや定数ではなくて，時間の関数になってしまう．

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.52}$$

しかしながら，摂動 $\hat{V}(t)$ が十分に小さければ，$c_n(t)$ の時間変化は，因子 $\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)$ に比べて，ゆっくりと起きるはずである．$c_n(t)$ の時間変化をみるために，(9.52)を(9.49)に代入すると，左辺は，

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle&=i\hbar\frac{d}{dt}\left(\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle\right)\\
&=\sum_n i\hbar\left(\frac{d}{dt}c_n(t)\right)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle\\
&\quad+\sum_n c_n(t)E_n^{(0)}\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle
\end{aligned} \tag{9.53}$$

となり，右辺は，

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle=(\hat{H}_0+\hat{V}(t))\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$=\sum_n c_n(t)E_n^{(0)}\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$+\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)\hat{V}(t)|\varphi_n^{(0)}\rangle \qquad (9.54)$$

となる．これらを等しいとおいて，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$ $(n=1,\ 2,\ \cdots)$ が完全系であることに注意すると，けっきょく，

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t)=\sum_m \exp\left[\frac{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right]\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle c_m(t) \qquad (9.55)$$

を得る．この方程式は，(9.52)の係数 $c_n(t)$ が摂動 $\hat{V}(t)$ の影響で時間の関数としてどのように変化するかを示している．

計算の見通しをよくするために，上で行ったことを相互作用表示で定式化しなおしておこう．まず，Schrödinger 表示から出発する．Schrödinger 表示での波動関数を $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ と書き，物理量 O の演算子を $\hat{O}_{\mathrm{S}}$ と書くことにすると，$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ の時間発展は，Schrödinger 方程式によって表され，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}=\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \qquad (9.56)$$

O の時刻 t における期待値は，

$$\overline{O}={}_{\mathrm{S}}\langle\psi(t)|\hat{O}_{\mathrm{S}}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \qquad (9.57)$$

で与えられるのであった．ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ は(9.50)のように分解されているとし，相互作用表示とよばれている新しい表示をつぎのように導入しよう．まず，相互作用表示での波動関数 $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ を，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}=\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \qquad (9.58)$$

で定義する．つぎに，相互作用表示における物理量 O の演算子 $\hat{O}_{\mathrm{I}}$ を，

$$\hat{O}_{\mathrm{I}}=\exp\left(-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}\right) \qquad (9.59)$$

で定義すると，(9.57)から明らかに，

$$\overline{O}={}_{\mathrm{I}}\langle\psi(t)|\hat{O}_{\mathrm{I}}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \qquad (9.60)$$

が成り立つ．Schrödinger 表示と Heisenberg 表示の関係を思い出せばすぐわかるように，相互作用表示は Schrödinger 表示と Heisenberg 表示の中間的なものであるといえる．相互作用表示における波動関数 $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ の時間発展の式を求めるために，(9.58)を(9.56)に代入しよう．

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left(\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}\right)=(\hat{H}_0+\hat{V}(t))\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.61}$$

この式の左辺は，$\hat{H}_0\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}+i\hbar\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ と書けるから，けっきょく，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.62}$$

が得られる．ここで，$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ は相互作用表示における摂動ハミルトニアンであり，

$$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)=\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)\hat{V}(t)\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right) \tag{9.63}$$

で与えられる．また，物理量 O が時間に陽に依存しなければ，Schrödinger 表示での対応する演算子 $\hat{O}_{\mathrm{S}}$ は時間によらないから，(9.59) より，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{I}}=-\frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_0,\hat{O}_{\mathrm{I}}] \tag{9.64}$$

が得られる．これは，Heisenberg 方程式に似ているが，右辺の交換子のなかには，全ハミルトニアン $\hat{H}$ ではなくて，非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ が現れている点が違っている．以上をまとめて標語的にいうと，相互作用表示とはハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}(t)$ のうち，$\hat{H}_0$ の部分を演算子の時間発展におしつけ，$\hat{V}(t)$ の部分を波動関数の時間発展におしつけたものといえる．

相互作用表示から，(9.55) が自然に導かれることをみるために，$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ を $\hat{H}_0$ の固有ベクトル $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ で展開しよう．

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\sum_n c_n(t)|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.65}$$

これを (9.62) に代入して，(9.63) を使うと，

$$\begin{aligned}&\sum_m i\hbar\frac{d}{dt}c_m(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle\\&=\sum_m c_m(t)\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)\hat{V}(t)\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\varphi_m^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{9.66}$$

となるが，この両辺と $\langle\varphi_n^{(0)}|$ との内積をとったものが，(9.55) にほかならない．また，(9.65) を (9.58) に代入すれば，

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}&=\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle\\&=\sum_n c_n(t)\exp\left(\frac{E_n^{(0)}t}{i\hbar}\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{9.67}$$

となるが，これは (9.52) そのものである．

相互作用表示における波動関数の時間発展を与える式 (9.62) を，少なくとも形式

的に解くことを考えよう．まず，(9.62)の両辺を t について t_0 から t まで積分し，適当に移項すると，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\,|\psi(t')\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.68}$$

となる．この式の右辺第2項の $|\psi(t')\rangle_{\mathrm{I}}$ にこの式で t を t' におきかえたものじしんを代入すると，

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=&|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\,|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\\&+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\int_{t_0}^{t'}dt''\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'')\,|\psi(t'')\rangle_{\mathrm{I}}\end{aligned} \tag{9.69}$$

となる．さらに，(9.69)の右辺の最後の項に(9.68)で t を t'' におきかえたものを代入すると，

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=&|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\,|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\\&+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'')\,|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\\&+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\int_{t_0}^{t''}dt'''\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'')\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t''')\,|\psi(t''')\rangle_{\mathrm{I}}\end{aligned} \tag{9.70}$$

となる．このような操作を繰り返して，最後の項に(9.68)を逐次代入していくと，けっきょくつぎのような無限級数が得られる．

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\left(1+\sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^k\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{k-1}}dt_k\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)\cdots\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_k)\right)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.71}$$

上で得られた表式(9.71)をもう少しコンパクトな形に書くために，時間順序積あるいはT積とよばれる記号を導入しよう．一般に，時間に依存するいくつかの演算子 $\hat{O}_1(t)$，$\hat{O}_2(t)$，… があって，同時刻ではすべて可換とする．

$$[\hat{O}_i(t),\hat{O}_j(t)]=0,\qquad (i,\ j\ \text{は任意}) \tag{9.72}$$

このとき，k 個の演算子 $\hat{O}_{i_1}(t_1)$，$\hat{O}_{i_2}(t_2)$，…，$\hat{O}_{i_k}(t_k)$ のT積とは，これらの演算子を時間の引数の大きなものから順に並べて積をとったものとして定義される．かける演算子の個数が小さい場合に具体的に書くと，つぎのようになる．

$k=1$ のとき　$$T(\hat{A}(t))=\hat{A}(t) \tag{9.73a}$$

$k=2$ のとき　$$T(\hat{A}(t)\hat{B}(t'))=\begin{cases}\hat{A}(t)\hat{B}(t') & t\geqq t'\ \text{のとき}\\ \hat{B}(t')\hat{A}(t) & t'\geqq t\ \text{のとき}\end{cases} \tag{9.73b}$$

$k=3$ のとき　$T(\hat{A}(t)\hat{B}(t')\hat{C}(t''))$

$$=\begin{cases}\hat{A}(t)\hat{B}(t')\hat{C}(t'') & t\geqq t'\geqq t'' \text{ のとき}\\ \hat{B}(t')\hat{A}(t)\hat{C}(t'') & t'\geqq t\geqq t'' \text{ のとき}\\ \hat{A}(t)\hat{C}(t'')\hat{B}(t') & t\geqq t''\geqq t' \text{ のとき}\\ \hat{C}(t'')\hat{A}(t)\hat{B}(t') & t''\geqq t\geqq t' \text{ のとき}\\ \hat{B}(t')\hat{C}(t'')\hat{A}(t) & t'\geqq t''\geqq t \text{ のとき}\\ \hat{C}(t'')\hat{B}(t')\hat{A}(t) & t''\geqq t'\geqq t \text{ のとき}\end{cases} \tag{9.73c}$$

ここで，時間の引数が等しい値をとる場合，たとえば，(9.73b)で $t=t'$ となる場合には積の順序に不定性があると思われるかもしれないが，もともと T 積の記号のなかに現れる演算子は同時刻で可換としているから問題は起きない．また，もちろん T 積のなかに同じ演算子が現れてもよい．たとえば，(9.73c)で，$\hat{A}$，$\hat{B}$，$\hat{C}$ はすべて同じ演算子でもよい(同じ演算子については，同時刻の可換性は自明である)．T 積を使うと，(9.71)に現れた項は，

$$\begin{aligned}&\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{k-1}}dt_k\,\hat{V}_{\rm I}(t_1)\cdots\hat{V}_{\rm I}(t_k)\\ &=\int_{t\geqq t_1\geqq t_2\cdots\geqq t_k\geqq t_0}dt_1dt_2\cdots dt_k\,\hat{V}_{\rm I}(t_1)\cdots\hat{V}_{\rm I}(t_k)\\ &=\frac{1}{k!}T\left(\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t}dt_k\,\hat{V}_{\rm I}(t_1)\cdots\hat{V}_{\rm I}(t_k)\right)\\ &=\frac{1}{k!}T\left(\left(\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\rm I}(t')\right)^k\right)\end{aligned} \tag{9.74}$$

のように簡単な形に書くことができる．(9.74)を(9.71)に代入すると，けっきょく，

$$|\psi(t)\rangle_{\rm I}=T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_{\rm I}(t')\right)|\psi(t_0)\rangle_{\rm I} \tag{9.75}$$

と書けることがわかる．ここで，右辺は exp を Taylor 展開したのち，各項における因子を T 積の順序に並べることを意味する．

(9.75)の表式は以下に示すように，(9.62)から直接導くこともできる．(9.62)を形式的に解くために，t_0 と t の間を十分大きな数 N 個に等分しよう(図 9.2)．各区間の長さは，もちろん，

$$\Delta t=\frac{t-t_0}{N} \tag{9.76}$$

で与えられる．N が十分大きければ，Δt は十分小さいから，(9.62)で時間に関する微分を差分でおきかえてもよい．すなわち，(9.62)は，

$$|\psi(t_{i+1})\rangle_{\rm I}=|\psi(t_i)\rangle_{\rm I}+\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\rm I}(t_i)|\psi(t_i)\rangle_{\rm I}$$

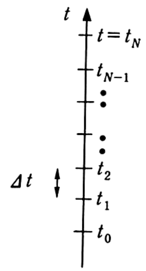


図9.2　t_0 と t の間を N 等分する

$$=\left(1+\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_i)\right)|\,\psi(t_i)\rangle_{\mathrm{I}}$$

$$=\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_i)\right)|\,\psi(t_i)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.77}$$

と書きかえてよい．これを繰り返し使うと，以下のようにして(9.75)と同じ結果が得られる．

$$|\,\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_{N-1})\right)\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_{N-2})\right)\cdot$$

$$\cdot\cdots\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_0)\right)|\,\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}$$

$$=T\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar}\left(\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_{N-1})+\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_{N-2})+\cdots+\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_0)\right)\right)|\,\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}$$

$$=T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right)|\,\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{9.78}$$

9.4　時間による摂動論

前節で得られた公式(9.71)は，摂動 $\hat{V}(t)$ によって状態ベクトルがどのように変化するかを示している．もう少し具体的にみるために，$|\,\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ を $\hat{H}_0$ の固有ベクトル $|\,\varphi_n^{(0)}\rangle$ で展開しよう．

$$|\,\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\sum_n c_n(t)\,|\,\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.79}$$

(9.71)の両辺と $\langle\varphi_n^{(0)}|$ の内積をとり，右辺では，

$$1=\sum_m|\,\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|$$

を何回か挿入することにより，

$$c_n(t)=c_n(t_0)+\sum_m \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, V_{nm}(t')c_m(t_0)$$
$$+\sum_m\sum_k\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \, V_{nk}(t') V_{km}(t'')c_m(t_0)$$
$$+\cdots \tag{9.80}$$

が得られる．ここで，$V_{nm}(t)$ は，

$$V_{nm}(t)=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle$$
$$=\exp\left[\frac{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right]\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle \tag{9.81}$$

で与えられる．

摂動のゼロ次，すなわち(9.80)の右辺の第1項だけをとると，当然ながら $c_n(t)=c_n(t_0)$ となり状態は変化しないことを意味する．(9.80)の右辺の第2項以下は，摂動 $\hat{V}(t)$ の影響によって状態が混ざってくることを示しているが，それらの $V_{nm}(t)$ のべきは，順に1次，2次，…となっているから，それらの項を摂動の1次の項，2次の項，…とよぶことにしよう．(9.80)はいろいろなタイプの摂動 $\hat{V}(t)$ に応用できるが，いくつかの場合を個別に議論しておこう．

(a) 有限時間だけ働く摂動による遷移

摂動 $\hat{V}(t)$ が有限時間だけ働く場合，すなわち，$|t|$ が十分大きければ $\hat{V}(t)$ はゼロである場合を調べよう．この場合，摂動が働く以前の状態が，摂動が働いた後にどのように変化しているかに興味がある．摂動が働く以前には，状態は $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ であったとしよう．それは，

$$\begin{aligned} c_n(-\infty)&=1 \\ c_k(-\infty)&=0 \qquad (k\neq n) \end{aligned} \tag{9.82}$$

ということである．摂動の1次までとると，(9.80)より，

$$c_n(\infty)=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \, V_{nn}(t') \tag{9.83a}$$

$$c_k(\infty)=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \, V_{kn}(t') \qquad (k\neq n) \tag{9.83b}$$

が得られる．摂動によって，状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ が状態 $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ $(k\neq n)$ に遷移する確率 $P_{n\to k}$ は，$|c_k(\infty)|^2$ であるから，(9.83b)より，

$$P_{n\to k}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dt' \, V_{kn}(t')\right|^2 \qquad (k\neq n) \tag{9.84}$$

が得られる．(9.84)が1に比べて小さな値を与えるならば，摂動による遷移確率は小さく，摂動論はよい近似になっているといってよい．

摂動 $\hat{V}(t)$ が時間について十分ゆっくりと変化する場合には，遷移確率は小さい量であることに注意しよう．なぜならば，(9.84)の右辺の絶対値記号のなかは，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, V_{kn}(t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right]\langle\varphi_k^{(0)}|\,\hat{V}(t')\,|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.85}$$

であるが，$\hat{V}(t)$ の時間変化が，$\dfrac{\hbar}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$ よりも十分にゆっくりと起きるとすると，積分は小さな値になるからである．

(b) $t=\pm\infty$ で一定値になる摂動

摂動 $\hat{V}(t)$ が $t=\pm\infty$ で一定の演算子に収束するような場合，すなわち，

$$\lim_{t\to-\infty}\hat{V}(t)=0,\quad \lim_{t\to+\infty}\hat{V}(t)=\hat{V}_0 \tag{9.86}$$

となるような場合を考えよう．ここで，$\lim_{t\to-\infty}\hat{V}(t)$ は $\hat{H}_0$ の定義に吸収できるから，簡単のためゼロとしておく．この場合，$t\to-\infty$ では状態を指定するために $\hat{H}_0$ の固有ベクトル $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ を使い，$t\to+\infty$ では状態を指定するために $\hat{H}_0+\hat{V}_0$ の固有ベクトルを使うのが適当であろう．$\hat{H}_0$ に縮退がなく，$\hat{V}_0$ は $\hat{H}_0$ に比べて十分小さいとすると，時間によらない摂動論からわかるように，$\hat{H}_0+\hat{V}_0$ の固有ベクトル $|\xi_n\rangle$ は，

$$|\xi_n\rangle=|\varphi_n^{(0)}\rangle+\sum_{m(\neq n)}\frac{|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\,\hat{V}_0\,|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+O(\hat{V}_0^2) \tag{9.87}$$

と書ける．ここでの目的は，$t=-\infty$ で $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ の状態にあったものが $t=+\infty$ で $|\xi_k\rangle$ に遷移する確率を求めることである．

この場合も，(9.82)と同様に初期値は，

$$\begin{aligned} c_n(-\infty)&=1\\ c_k(-\infty)&=0 \qquad (k\neq n)\end{aligned} \tag{9.88}$$

で与えられるが，単純に(9.83)を適用すると，積分の上端で発散している．これを避けるためには，(9.80)で極限 $t\to\infty$ はとらずに，$t_0\to-\infty$ だけとって有限の t に対する式を書けばよい．そうすると，摂動の1次までで，

$$c_n(t)=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,V_{nn}(t') \tag{9.89a}$$

$$c_k(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,V_{kn}(t') \qquad (k\neq n) \tag{9.89b}$$

となる．第2式は，$V_{kn}(t')=\exp\left(\dfrac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right)\langle\varphi_k^{(0)}|\,\hat{V}(t')\,|\varphi_n^{(0)}\rangle$ に注意して部分積分を行うと，

$$c_k(t)=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\left[\exp\left(\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right)\langle\varphi_k^{(0)}|\,\hat{V}(t')\,|\varphi_n^{(0)}\rangle\right]_{t'=-\infty}^{t'=t}$$

$$-\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\int_{-\infty}^{t}dt'\exp\left(\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right)\langle\varphi_k^{(0)}|\frac{\partial}{\partial t'}\hat{V}(t')|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.90}$$

となる．$t=\pm\infty$で$\hat{V}(t)$は一定の演算子に収束するから，$\lim_{t\to\pm\infty}\frac{\partial}{\partial t}\hat{V}(t)=0$であり，

$$c_k(t)=\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t\right]\frac{\langle\varphi_k^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$
$$-\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right]\langle\varphi_k^{(0)}|\frac{\partial}{\partial t'}\hat{V}(t')|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$(t\to\infty) \tag{9.91}$$

を得る．

ところで，$\hat{V}(t)$が十分にゆるやかに変化するとすると，(9.91)の右辺の第2項はゼロになるから，$t\to\infty$のときの相互作用表示の波動関数$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$は，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\sum_n c_n(t)|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$=\left(1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,V_{nn}(t')\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle$$
$$+\sum_{m(\neq n)}\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}{i\hbar}t\right]\frac{|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}+O(\hat{V}_0^2)$$
$$=\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,V_{nn}(t')\right]\cdot$$
$$\cdot\left(|\varphi_n^{(0)}\rangle+\sum_{m(\neq n)}\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}{i\hbar}t\right]\frac{|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right)$$
$$+O(\hat{V}_0^2)\qquad(t\to\infty) \tag{9.92}$$

と書ける．

一方，$t\to\infty$のときに，(9.87)で与えられる状態$|\xi_n(t)\rangle_{\mathrm{S}}=\exp\left(\frac{E_n}{i\hbar}t\right)|\xi_n\rangle$が相互作用表示ではどのようにみえるかを考えてみよう．ここでE_nは，$\hat{H}_0+\hat{V}_0$の$|\xi_n\rangle$に対応する固有値である．一般的な関係式(9.58)を思い出すと，

$$|\xi_n(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\xi_n(t)\rangle_{\mathrm{S}}$$
$$=\exp\left(\frac{E_n}{i\hbar}t\right)\left\{\exp\left(-\frac{E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right)|\varphi_n^{(0)}\rangle\right.$$
$$\left.+\sum_{m(\neq n)}\exp\left(-\frac{E_m^{(0)}}{i\hbar}t\right)\frac{|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right\}+O(\hat{V}^2)$$
$$=\exp\left[\frac{E_n-E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right]\left\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\right.$$
$$\left.+\sum_{m(\neq n)}\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}{i\hbar}t\right]\frac{|\varphi_m^{(0)}\rangle\langle\varphi_m^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right\}+O(\hat{V}^2) \tag{9.93}$$

となることがわかる．(9.92)と(9.93)を見くらべると明らかに，この2つは位相因子だけの違いである．

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=e^{i\theta(t)}|\xi_n(t)\rangle_{\mathrm{I}} \qquad (t\to\infty) \tag{9.94}$$

ここで，$\theta(t)$ は，

$$\theta(t)=\frac{1}{\hbar}\left\{(E_n-E_n^{(0)})t-\int_{-\infty}^{t}dt'\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}(t')|\varphi_n^{(0)}\rangle\right\} \tag{9.95}$$

で与えられる．1次摂動では，$E_n-E_n^{(0)}=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle$ であり，また，$\lim_{t\to+\infty}\hat{V}(t')=\hat{V}_0$ であったことを思い出すと，(9.95)で与えられる θ は $t\to\infty$ では t に依存しない定数になることがわかる．けっきょく，摂動が十分にゆっくりと変化する場合は，$t\to-\infty$ におけるエネルギー固有状態は，$t\to\infty$ におけるエネルギー固有状態に移行するだけで，ここで考えている意味では遷移を起こさないことがわかる．ここでは，摂動は $\hat{H}_0$ に比べて十分小さいとしたが，大きな摂動でも，小さな摂動を何回も繰り返すことにより得られるから，この結果は，ハミルトニアンが時間とともにゆっくり変化するときにはいつでも成り立つとしてよい．しかし，各時刻においてハミルトニアンの考えている固有ベクトルが縮退していないことが必要である．このように，ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ が時間とともにゆっくり変化するときには，定常状態は縮退していなければ，常に定常状態でありつづけるという事実を**断熱定理**とよんでいる．

摂動が十分小さいが，断熱的ではないときに戻って，遷移確率を求めよう．上で議論したように，(9.91)の右辺の第1項は，断熱的な変化を与えるだけであるから，いま考えている遷移は，(9.91)の右辺の第2項で与えられる．1次摂動の範囲では，この第2項に現れる $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ は $|\xi_n\rangle$ と区別する必要がないから，けっきょく，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$ が $|\xi_k\rangle$ に遷移する確率 $P_{n\to k}$ $(k\neq n)$ は，

$$P_{n\to k}=\frac{1}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}\cdot \cdot\left|\int_{-\infty}^{\infty}dt'\exp\left[\frac{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}{i\hbar}t'\right]\langle\varphi_k^{(0)}|\frac{\partial}{\partial t'}\hat{V}(t')|\varphi_n^{(0)}\rangle\right|^2 \tag{9.96}$$

で与えられる．

(c) 周期的な摂動

摂動 $\hat{V}(t)$ が，

$$\hat{V}(t)=\hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{F}^{\dagger}e^{i\omega t} \tag{9.97}$$

の形のときを考えよう．(9.97)を(9.81)に代入すると，

$$V_{nm}(t)=\exp\left[\frac{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}{i\hbar}t\right]\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle$$

$$=\exp[-i(\omega_m-\omega_n+\omega)t]F_{nm} \tag{9.98}$$
$$+\exp[-i(\omega_m-\omega_n-\omega)t]F^*_{mn}$$

となる．ここで，ω_n，F_{nm} は，

$$E_n^{(0)}=\hbar\omega_n \tag{9.99}$$

$$F_{nm}=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{F}|\varphi_m^{(0)}\rangle \tag{9.100}$$

によって定義した．$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ の初期値としては，$t=0$ において，

$$|\psi(0)\rangle_{\mathrm{I}}=|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.101}$$

すなわち，

$$c_n(0)=1$$
$$c_k(0)=0 \qquad (k\neq n) \tag{9.102}$$

としよう．(9.98) を (9.80) に代入すると，摂動の1次までで，

$$c_k(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,V_{kn}(t')$$
$$=\frac{1-\exp[i(\omega_k-\omega_n-\omega)t]}{\hbar(\omega_k-\omega_n-\omega)}F_{kn} \tag{9.103}$$
$$+\frac{1-\exp[i(\omega_k-\omega_n+\omega)t]}{\hbar(\omega_k-\omega_n+\omega)}F^*_{nk}$$

となり，時刻 t において状態が $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ である確率は，$|c_k(t)|^2$ で与えられる．$|\varphi_k^{(0)}\rangle$ が離散スペクトルに属する場合は，この式がよい近似であるためには，$|c_k(t)|^2$ は，1に比べて小さい量でなければならない．たとえば，ω が，任意の $k(\neq n)$ に対して $\pm(\omega_k-\omega_n)$ から十分離れた値のときは，(9.103)の分母は小さくないので，よい近似であるといえる．すなわち，共鳴の条件，

$$E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\simeq\pm\hbar\omega \tag{9.104}$$

をみたすような状態 $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ がなければ，状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ が周期摂動(9.97)によって他の状態に遷移する確率は小さい．

逆に，共鳴の条件(9.104)に近い状態 $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ があると，(9.103)はもはや有効ではないが，状態 $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ に遷移する確率は大きな値をとりうると期待される．このような場合でも，$|\varphi_k^{(0)}\rangle$ からの共鳴の条件，

$$E_l^{(0)}-E_k^{(0)}\simeq\pm\hbar\omega \tag{9.105}$$

をみたすような状態 $|\varphi_l^{(0)}\rangle$ が $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ 以外になければ，$|\varphi_k^{(0)}\rangle$ から $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ 以外の状態に遷移する確率は依然として小さい．すなわち，$E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\simeq\hbar\omega$ のとき，任意の状態 $|\varphi_l^{(0)}\rangle$ $(l\neq n,\ l\neq k)$ に対して，$E_l^{(0)}-E_n^{(0)}$ も $E_l^{(0)}-E_k^{(0)}$ も $\pm\hbar\omega$ に近くなければ，2つの状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ と $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ の間で起こる遷移だけ考えれば十分である．けっきょくこの場合には，厳密な式(9.55)において，2つの変数 $c_n(t)$ と $c_k(t)$ だけを残して，他

の $c_l(t)$ はゼロとおいたものを調べればよい．そうすると，(9.55)から，

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t)=V_{nn}(t)c_n(t)+V_{nk}(t)c_k(t)$$
$$=(F_{nn}e^{-i\omega t}+F_{nn}^*e^{i\omega t})c_n(t)$$
$$+\Big(\exp[-i(\omega_k-\omega_n+\omega)t]F_{nk}$$
$$+\exp[-i(\omega_k-\omega_n-\omega)t]F_{kn}^*\Big)c_k(t) \tag{9.106a}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_k(t)=V_{kn}(t)c_n(t)+V_{kk}(t)c_k(t)$$
$$=\Big(\exp[-i(\omega_n-\omega_k+\omega)t]F_{kn}$$
$$+\exp[-i(\omega_n-\omega_k-\omega)t]F_{nk}^*\Big)c_n(t)$$
$$+(F_{kk}e^{-i\omega t}+F_{kk}^*e^{i\omega t})c_k(t) \tag{9.106b}$$

が得られる．ここで，$\omega_k-\omega_n$ は ω に近いとして，

$$\omega_k-\omega_n=\omega+\varepsilon \tag{9.107}$$

とおこう．このとき，(9.106)で $e^{\pm i\omega t}$ や $\exp[-i(\omega_k-\omega_n+\omega)t]$ に比例する項は，他の項に比べて速く振動するから，大きな寄与を与えないので無視することができる．そのような項をおとすと，(9.106)は，

$$i\frac{d}{dt}c_n(t)=e^{-i\varepsilon t}F^*c_k(t) \tag{9.108a}$$

$$i\frac{d}{dt}c_k(t)=e^{i\varepsilon t}Fc_n(t) \tag{9.108b}$$

となる．ここで，簡単のため，

$$F=\frac{1}{\hbar}F_{kn} \tag{9.109}$$

とおいた．

ここで，

$$\begin{aligned}c_n(t)&=\exp\Big(-i\frac{\varepsilon}{2}t\Big)b_n(t)\\ c_k(t)&=\exp\Big(i\frac{\varepsilon}{2}t\Big)b_k(t)\end{aligned} \tag{9.110}$$

とおくと，(9.108)は，

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}b_n(t)\\ b_k(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{\varepsilon}{2} & F^*\\ F & \frac{\varepsilon}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_n(t)\\ b_k(t)\end{pmatrix} \tag{9.111}$$

と書きなおせる．この方程式は，右辺の行列を対角化することにより簡単に解けて，

$$\begin{pmatrix} b_n(t) \\ b_k(t) \end{pmatrix} = \alpha e^{i\lambda t}\begin{pmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{pmatrix} + \beta e^{-i\lambda t}\begin{pmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{pmatrix} \tag{9.112}$$

となる．ここで $-\lambda$，λ は(9.111)の右辺の行列 の固有値であり，

$$\lambda = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + FF^*} \tag{9.113}$$

で与えられ，それらに対応する固有ベクトルは，

$$\begin{pmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{pmatrix} = N\begin{pmatrix} \dfrac{\varepsilon}{2} + \sqrt{\dfrac{\varepsilon^2}{4} + FF^*} \\ -F \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{pmatrix} = N\begin{pmatrix} F^* \\ \dfrac{\varepsilon}{2} + \sqrt{\dfrac{\varepsilon^2}{4} + FF^*} \end{pmatrix} \tag{9.114}$$

である．これらを規格化するためには，

$$N = \left(FF^* + \left(\frac{\varepsilon}{2} + \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + FF^*}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{9.115}$$

としておけばよい．初期値が $t=0$ で，$c_n(0)=1$，$c_k(0)=0$，すなわち，$b_n(0)=1$，$b_k(0)=0$ であるような解を得るためには，(9.112)で，

$$\alpha = v_1^{(1)*}, \quad \beta = v_1^{(2)*} \tag{9.116}$$

とおけばよい．実際，

$$\begin{aligned} b_n(t) &= |v_1^{(1)}|^2 e^{i\lambda t} + |v_1^{(2)}|^2 e^{-i\lambda t} \\ &= (|v_1^{(1)}|^2 + |v_1^{(2)}|^2)\cos\lambda t + i(|v_1^{(1)}|^2 - |v_1^{(2)}|^2)\sin\lambda t \\ &= \cos\lambda t + i(|v_1^{(1)}|^2 - |v_1^{(2)}|^2)\sin\lambda t \end{aligned} \tag{9.117a}$$

$$\begin{aligned} b_k(t) &= v_1^{(1)*} v_2^{(1)} e^{i\lambda t} + v_1^{(2)*} v_2^{(2)} e^{-i\lambda t} \\ &= 2i\, v_1^{(1)*} v_2^{(1)} \sin\lambda t \end{aligned} \tag{9.117b}$$

が得られる．ここで，(9.114)で与えられる固有ベクトルが正規直交であることを使った．けっきょく，時刻 t で状態が $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ にある確率は，

$$\begin{aligned} |c_k(t)|^2 &= |b_k(t)|^2 = 4|v_1^{(1)}|^2 |v_2^{(1)}|^2 \sin^2\lambda t \\ &= \frac{4FF^*\left(\dfrac{\varepsilon}{2} + \sqrt{\dfrac{\varepsilon^2}{4} + FF^*}\right)^2}{\left\{FF^* + \left(\dfrac{\varepsilon}{2} + \sqrt{\dfrac{\varepsilon^2}{4} + FF^*}\right)^2\right\}^2} \sin^2\lambda t \end{aligned} \tag{9.118}$$

で与えられるように，周期 $\dfrac{\pi}{\lambda}$ で振動することがわかる．

また，一般の ε の値に対しては，$|c_k(t)|^2$ の最大値は1より小さい．しかし，とくに共鳴条件 $E_k^{(0)}-E_n^{(0)}=\hbar\omega$ がみたされているときは，(9.118)および(9.113)で $\varepsilon=0$ とおくと，

$$|c_k(t)|^2=\sin^2(|F|t) \tag{9.119}$$

となり，時刻 $t=\dfrac{\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi}{|F|}$ （n は整数）では，状態は純粋に $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ になる．すなわち，系は，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$ と $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ の間を周期的に行ったり来たりするわけである．

9.5 連続スペクトルへの遷移

前節では，おもに，摂動の影響によって離散準位の間にどのような遷移が起こるかを議論した．摂動論の実際の応用としては，始状態あるいは終状態が連続スペクトルに属するときも重要であるので，いろいろな場合を考えてみることにしよう．まず，前節で基本になった公式(9.80)は，連続スペクトルがある場合も，少し修正してやれば，そのまま成り立つことに注意しよう．いまの場合，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルには，離散準位 $E_n^{(0)}$ （$n=1, 2, \cdots$）に対応するものと，連続準位 $E_\nu^{(0)}$ に対応するものがあるが，それらを $|\varphi_n^{(0)}\rangle$，$|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ と書くことにしよう．

$$\hat{H}_0|\varphi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.120a}$$

$$\hat{H}_0|\varphi_\nu^{(0)}\rangle=E_\nu^{(0)}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle \tag{9.120b}$$

ここで，ν は連続準位をラベルする変数であり，いくつかの実数の組であるが，まとめて1つのギリシャ文字で表しておく．また，$|\varphi_n^{(0)}\rangle$，$|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ はつぎのように規格化されているとする[1]．

$$\langle\varphi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle=\delta_{m,n} \tag{9.121a}$$

$$\langle\varphi_\mu^{(0)}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle=\delta(\mu-\nu) \tag{9.121b}$$

相互作用表示の波動関数を，(9.79)と同様に，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルで展開すると，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\sum_n c_n(t)|\varphi_n^{(0)}\rangle+\int d\nu\ c_\nu(t)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle \tag{9.122}$$

と書けるが，式を簡単にするために，右辺の2つの項をまとめて，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\sum\!\!\!\!\!\!\int_n c_n(t)|\varphi_n^{(0)}\rangle \tag{9.123}$$

と書くことにしよう．すなわち，記号 $\sum\!\!\!\!\!\!\int$ は離散準位については和をとり，連続準位

1) ここで，第2式の右辺の δ-関数は，μ や ν が k 個の実数を表しているときは，k 次元の δ-関数を表しているとする．同様に，$\int d\nu$ と書けば，k 重積分の意味であると解釈しなければいけない．

については積分をとって加え合わせることを意味しているとする．このような記号を使うと，完全性の条件は，

$$1=\sum_n|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}|+\int d\nu\,|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\langle\varphi_\nu^{(0)}|=\sum\!\!\!\!\!\!\!\int_n|\varphi_n^{(0)}\rangle\langle\varphi_n^{(0)}| \tag{9.124}$$

のように表される．このように書くことにすると，公式(9.80)は，状態に関する和を $\sum\!\!\!\!\!\!\!\int$ でおきかえれば，そのまま成り立つことは明らかであろう．

$$\begin{aligned}c_n(t)=c_n(t_0)&+\sum\!\!\!\!\!\!\!\int_m\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_{nm}(t')c_m(t_0)\\&+\sum\!\!\!\!\!\!\!\int_m\sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,V_{nk}(t')V_{km}(t'')c_m(t_0)\\&+\cdots\end{aligned} \tag{9.125}$$

ここで，$V_{nm}(t)$ はやはり(9.81)で与えられるが，n や m が連続準位のときは，対応する連続準位の固有ベクトルによる行列要素をとればよい．すなわち，

$$\begin{aligned}V_{nm}(t)&=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle\\V_{n\mu}(t)&=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\varphi_\mu^{(0)}\rangle\\V_{\nu m}(t)&=\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\varphi_m^{(0)}\rangle\\V_{\nu\mu}(t)&=\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\varphi_\mu^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{9.126}$$

である．つぎに，いろいろな場合を具体的に考えてみよう．

(a) 周期摂動による離散準位から連続準位への遷移

非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有状態が，図9.3のように，離散準位 $E_n^{(0)}$ ($n=1$, 2, …)と連続準位 $E_\nu^{(0)}$ に分かれているとしよう．すなわち，連続準位は最小値 E_{min} をもち，離散準位はすべて E_{min} より小さい値をもつとしよう．摂動としては，前節(c)の場合と同様に，

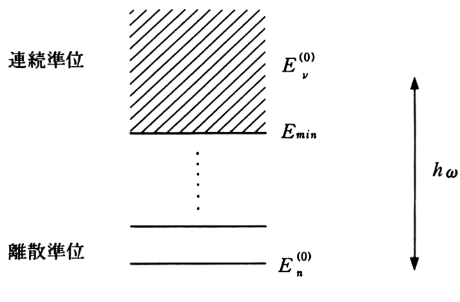


図 9.3 離散準位から連続準位への遷移

$$\hat{V}(t)=\hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{F}^{\dagger}e^{i\omega t} \tag{9.127}$$

の形のものを考え，図9.3のように離散準位の1つ $E_n^{(0)}$ に $\hbar\omega$ を加えたものは，連続準位に属しているとする．時刻 $t=0$ で，状態が離散準位 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ にあったとき，摂動によってどのような遷移が起こるかを考えよう．

初期値として，$|\psi(0)\rangle_I=|\varphi_n^{(0)}\rangle$，すなわち，

$$\begin{aligned} &c_n(0)=1\\ &c_k(0)=0 \qquad (k\neq n)\\ &c_\nu(0)=0 \end{aligned} \tag{9.128}$$

とすると，(9.125)より，摂動の1次までで，

$$\begin{aligned} c_n(t)&=1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,V_{nn}(t')\\ c_k(t)&=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,V_{kn}(t') \qquad (k\neq n)\\ c_\nu(t)&=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,V_{\nu n}(t') \end{aligned} \tag{9.129}$$

となることがわかる．右辺の行列要素は(9.98)と同様にして，

$$\begin{aligned} V_{kn}(t)&=\exp[-i(\omega_n-\omega_k+\omega)t]F_{kn}+\exp[-i(\omega_n-\omega_k-\omega)t]F_{nk}^*\\ V_{\nu n}(t)&=\exp[-i(\omega_n-\omega_\nu+\omega)t]F_{\nu n}+\exp[-i(\omega_n-\omega_\nu-\omega)t]F_{n\nu}^* \end{aligned} \tag{9.130}$$

となる．ここで，ω_n，ω_ν，F_{nm}，$F_{\nu n}$ などは，

$$\begin{aligned} &E_n^{(0)}=\hbar\omega_n,\quad E_\nu^{(0)}=\hbar\omega_\nu\\ &F_{nm}=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{F}|\varphi_m^{(0)}\rangle,\quad F_{\nu n}=\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{F}|\varphi_n^{(0)}\rangle \end{aligned} \tag{9.131}$$

で定義されているとする．(9.130)を(9.129)に代入すると，

$$\begin{aligned} c_k(t)=&\frac{1-\exp[i(\omega_k-\omega_n-\omega)t]}{\hbar(\omega_k-\omega_n-\omega)}F_{kn}\\ &+\frac{1-\exp[i(\omega_k-\omega_n+\omega)t]}{\hbar(\omega_k-\omega_n+\omega)}F_{nk}^* \quad (k\neq n) \end{aligned} \tag{9.132a}$$

$$\begin{aligned} c_\nu(t)=&\frac{1-\exp[i(\omega_\nu-\omega_n-\omega)t]}{\hbar(\omega_\nu-\omega_n-\omega)}F_{\nu n}\\ &+\frac{1-\exp[i(\omega_\nu-\omega_n+\omega)t]}{\hbar(\omega_\nu-\omega_n+\omega)}F_{n\nu}^* \end{aligned} \tag{9.132b}$$

が得られる．

ところで，上の2つの式は同じような形をしているが，物理的にはかなり異なる内容をもっている．$c_k(t)$ は離散準位 $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ の係数であるから，$|c_k(t)|^2$ は時刻 t で状態が $|\varphi_k^{(0)}\rangle$ にある確率を表しているとしてよい．一方，$c_\nu(t)$ は連続準位 $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ の係数であるから，$|c_\nu(t)|^2$ は時刻 t で状態が $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ のそばにある確率密度と解釈しなく

てはいけない．もう少しくわしくいうと，時刻 t において状態をラベルする変数が ν から $\nu+d\nu$ の間にある確率は，$|c_\nu(t)|^2 d\nu$ で与えられる．すなわち，物理的に意味のある量は，$|c_\nu(t)|^2$ そのものというよりも，$|c_\nu(t)|^2$ を ν のある領域にわたって積分したものであるといえる．いまの場合，図 9.3 のような状況を考えているから，(9.132) で与えられる $c_k(t)$，$c_\nu(t)$ のうち分母が小さな値になりうるのは，連続準位で共鳴条件

$$E_\nu^{(0)}-E_n^{(0)}\simeq\hbar\omega \tag{9.133}$$

が成り立つものの付近だけである．すなわち，(9.132b) の右辺で第 1 項のみを残して，

$$c_\nu(t)=\frac{1-\exp[i(\omega_\nu-\omega_n-\omega)t]}{\hbar(\omega_\nu-\omega_n-\omega)}F_{\nu n} \tag{9.134}$$

を考えれば十分である．この式から容易に，

$$|c_\nu(t)|^2=\left\{\frac{2\sin\dfrac{(\omega_\nu-\omega_n-\omega)t}{2}}{\hbar(\omega_\nu-\omega_n-\omega)}\right\}^2\cdot|F_{\nu n}|^2 \tag{9.135}$$

が得られる．右辺の第 1 因子を ω_ν の関数とみなすと，t がある程度大きいときは，

$$\omega_\nu\sim\omega_n+\omega \tag{9.136}$$

に中心をもち，幅 $\varDelta\omega_\nu$ が，

$$\varDelta\omega_\nu\sim\frac{1}{t} \tag{9.137}$$

程度の関数と思ってよい．一方，(9.135) の右辺の第 2 因子 $|F_{\nu n}|^2$ は ν に関しては通常，なめらかな関数であるから，t が十分大きいときは，第 1 因子は，$\delta(\omega_\nu-\omega_n-\omega)$ に比例するものとしてよい．すなわち，(9.135) の右辺で，形式的なおきかえ，

$$\left\{\frac{2\sin\dfrac{(\omega_\nu-\omega_n-\omega)t}{2}}{\hbar(\omega_\nu-\omega_n-\omega)}\right\}^2\longrightarrow t\cdot\frac{2\pi}{\hbar^2}\,\delta(\omega_\nu-\omega_n-\omega) \tag{9.138}$$

をしてよいことになる．

例題 1　(9.138) を示せ．

解　$f(x,t)=\left(\dfrac{\sin xt}{x}\right)^2$ を x の関数として図示すると，図 9.4 のようになる．この関数は $x=0$ 付近にピークをもっており，幅 $\varDelta x$ は $\dfrac{1}{t}$ 程度であるから，$t\to\infty$ では $\delta(x)$ に比例するとしてよい．比例係数を決めるために，$\int_{-\infty}^{\infty}f(x,t)dx$ を計算すると，

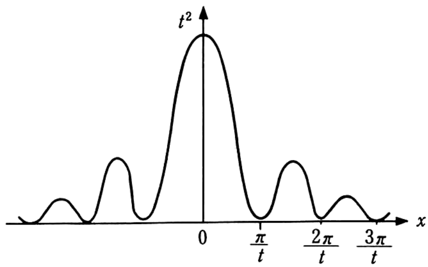


図 9.4

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x,t)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} t^2\left(\frac{\sin xt}{xt}\right)^2 dx = t\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\sin y}{y}\right)^2 dy$$
$$= t\pi$$

となるから，けっきょく，

$$\left(\frac{\sin xt}{x}\right)^2 \xrightarrow[t\to\infty]{} t\pi\delta(x) \qquad ⓐ$$

がわかる．この公式で，$x=\dfrac{\omega_\nu-\omega_n-\omega}{2}$ とおくと，(9.138)が得られる． ∎

ところで，t がある程度大きいときに，(9.135)に(9.138)のおきかえを行うと，

$$\begin{aligned} |c_\nu(t)|^2 &\simeq t\cdot\frac{2\pi}{\hbar^2}\delta(\omega_\nu-\omega_n-\omega)|F_{\nu n}|^2 \\ &= t\cdot\frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_\nu^{(0)}-E_n^{(0)}-\hbar\omega)\,|F_{\nu n}|^2 \end{aligned} \qquad (9.139)$$

となり，$|c_\nu(t)|^2$ はt に比例している．このことから，単位時間あたりの遷移確率は，$\dfrac{1}{t}|c_\nu(t)|^2$ で与えられることがわかる．すなわち，状態 $|\varphi_n^{(0)}\rangle$ から連続スペクトルへの単位時間あたりの遷移確率は，

$$dw_{n\to\nu} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_\nu^{(0)}-E_n^{(0)}-\hbar\omega)\,|F_{\nu n}|^2 d\nu \qquad (9.140)$$

で与えられる．ここでは，1つの状態 $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ への遷移を考えているのではなくて，パラメーター ν が ν と $\nu+d\nu$ の間にあるような状態のどれかへ遷移する確率の和を考えていることに注意しよう．

例題 2　(9.140)の右辺が実際に単位時間あたりの遷移確率の次元をもっていることを確かめよ．

解 (9.127)より $\hat{F}$ はエネルギーの次元をもっているから, (9.131)より, $|F_{\nu n}|^2 d\nu$ はエネルギーの2乗の次元をもっていることがわかる((9.124)からわかるように, $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\langle\varphi_\nu^{(0)}|d\nu$ は無次元量であることに注意しよう).
このことから, (9.140)の右辺は,

$$\frac{1}{\hbar}\frac{1}{(\text{エネルギー})}(\text{エネルギー})^2 \sim \frac{1}{(\text{時間})}$$

の次元をもっていることがわかる. ∎

(b) 時間によらない摂動による連続準位間の遷移

時間に依存しない摂動によってひきおこされる連続準位の間の遷移について考えよう. 簡単のため, 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ は, (9.120b)のように ν でラベルされた連続準位だけをもち, 離散準位はもたないとする. 時刻 $t=0$ ではじめの状態が ν_0 で表されていたとすると, (9.122)の展開において,

$$c_\nu(t_0)=\delta(\nu-\nu_0) \tag{9.141}$$

であるから, (9.125)より摂動の1次まででは,

$$c_\nu(t)=\delta(\nu-\nu_0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,V_{\nu\nu_0}(t') \tag{9.142}$$

となる. ここで, 右辺に現れる行列要素 $V_{\nu\nu_0}(t)$ は(9.81)と同様に,

$$\begin{aligned}V_{\nu\nu_0}(t)&=\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}_\text{I}(t)|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle\\&=\exp[-i(\omega_{\nu_0}-\omega_\nu)t]\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{9.143}$$

で与えられる. これを(9.142)に代入して積分を実行すると,

$$c_\nu(t)=\delta(\nu-\nu_0)+\frac{1-\exp[i(\omega_\nu-\omega_{\nu_0})t]}{\hbar(\omega_\nu-\omega_{\nu_0})}\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle \tag{9.144}$$

となり, $\nu\neq\nu_0$ のときは,

$$|c_\nu(t)|^2=\left\{\frac{2\sin\dfrac{(\omega_\nu-\omega_{\nu_0})t}{2}}{\hbar(\omega_\nu-\omega_{\nu_0})}\right\}^2|\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle|^2 \tag{9.145}$$

であることがわかる. ここで, (9.138)と同様のおきかえをすると, t がある程度大きいときには, (9.139)と同様にして,

$$|c_\nu(t)|^2\simeq t\cdot\frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_\nu^{(0)}-E_{\nu_0}^{(0)})|\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle|^2 \tag{9.146}$$

が得られる. これは t に比例しているから, (9.140)と同様に, 単位時間あたりの遷移確率が,

$$dw_{\nu_0\to\nu}=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_\nu^{(0)}-E_{\nu_0}^{(0)})|\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu_0}^{(0)}\rangle|^2 d\nu \qquad (\nu\neq\nu_0) \tag{9.147}$$

で与えられることがわかる．この式は，(9.140)と似た形をしているが，始状態 ν_0 も連続準位に属している点が違っている．そのため，始状態の規格化をきちんと定めておかないで，(9.147)をそのまま単位時間あたりの遷移確率と解釈することはできない．

始状態の規格化をくわしく考えるために，具体例として1次元のポテンシャルによる散乱を考えよう．図9.5(a)に示されているように，有限の幅をもつポテンシャル障壁の左側から，粒子を波束として入射しよう．入射された波束はポテンシャル障壁に近づいていき，散乱された後には反射波と透過波の重ね合わせになるだろう．ここでは，粒子の運動エネルギーを非摂動ハミルトニアンとし，ポテンシャル障壁を摂動として扱ってみよう．すなわち，

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}, \quad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{9.148}$$

であり，$\hat{V}$ は図9.5のような有限の幅をもつポテンャルである．$\hat{H}_0$ は1次元の自由粒子のハミルトニアンであるから，運動量 $\hat{p}$ を対角化する基底をとれば，$\hat{H}_0$ は対角化されている．すなわち，運動量が p の平面波の状態を $|p\rangle$ とすると，

$$\hat{p}|p\rangle=p|p\rangle \tag{9.149}$$

および，

$$\hat{H}_0|p\rangle=\frac{p^2}{2m}|p\rangle \tag{9.150}$$

となっている．ここで $|p\rangle$ は通常のとおり，

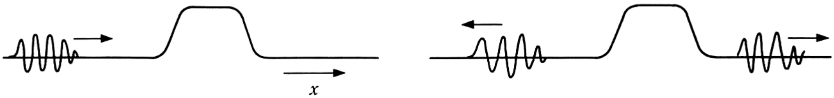
$$\langle p'|p''\rangle=\delta(p'-p'') \tag{9.151}$$

のように規格化されているとする．相互作用表示で考えることにすると，(9.122)はいまの場合，

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\int dp\, c_p(t)|p\rangle \tag{9.152}$$

と書ける[1]．ところで，ある時刻 t_0 で状態が図9.5(a)のように入射波束になっているとすると，時間を $-\infty$ の方向にさかのぼっても，波束はポテンシャル障壁から遠ざかるだけであり，ポテンシャルは時間発展に影響を与えない．すなわち，相互作用表示では，t が十分負に大きいときには波動関数 $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ は t に依存しなくなると考えてよい．同様に，t が十分大きいときは，図9.5(b)のように，反射波および透過波はポテンシャル障壁からどんどん遠ざかっていき，やはりポテンシャルは波動

1)　ここで，$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ は1に規格化されているとする．したがって，$\int dp|c_p(t)|^2=1$ がみたされている．



(a) 入射波束　　(b) 反射および透過波束

図9.5　1次元のポテンシャルによる散乱

関数の時間発展に影響しなくなる．すなわち，t が正に十分大きいときも，相互作用表示の波動関数 $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ は t に依存しなくなるとしてよい．

それゆえ，波束の散乱を考えるためには，(9.152)のように展開したときの係数 $c_p(t)$ の $t=+\infty$ における値を $t=-\infty$ における値で表してやればよい．そのためには(9.125)で $t_0=-\infty$，$t=\infty$ とおけばよいが，いまの場合，摂動の1次まででは，

$$c_p(\infty)=c_p(-\infty)+\frac{1}{i\hbar}\int dq\int_{-\infty}^{\infty}dt'\,V_{pq}(t')c_q(-\infty) \tag{9.153}$$

となる．この右辺に，(9.143)に相当する式

$$V_{pq}(t)=\exp[-i(\omega_q-\omega_p)t]\langle p|\hat{V}|q\rangle \tag{9.154}$$

$$\hbar\omega_p=E_p=\frac{p^2}{2m} \tag{9.155}$$

を代入して，t' についての積分を遂行すると，

$$c_p(\infty)=c_p(-\infty)-2\pi i\int dq\;\delta(E_p-E_q)\langle p|\hat{V}|q\rangle c_q(-\infty) \tag{9.156}$$

が得られる．これから，運動量が p と $p+dp$ の間にある状態に散乱される確率は，

$$|c_p(\infty)|^2dp=\left|\int dq\{\delta(p-q)-2\pi i\;\delta(E_p-E_q)\langle p|\hat{V}|q\rangle\}c_q(-\infty)\right|^2dp \tag{9.157}$$

で与えられることがわかる．

この式の意味をくわしく議論するために，入射波束は平均の運動量 p_0 をもち，運動量の不確定性は非常に小さいとしよう．いいかえると，$c_q(-\infty)$ は q の関数として，$q=p_0$ のところに鋭いピークをもち，q がそのピークの幅程度の変化をしても，行列要素 $\langle p|\hat{V}|q\rangle$ は一定値 $\langle p|\hat{V}|p_0\rangle$ としてもよいと仮定する．このようにして $c_q(-\infty)$ が $q=p_0$ の付近でだけゼロでないとすると，(9.157)の右辺は，$E_p=E_{p_0}$ すなわち，$p=\pm p_0$ の付近でだけゼロでない値になりうる．ここでは簡単のため，$p=-p_0$ の付近，すなわち反射波を考えてみよう．この場合は，(9.157)の被積分関数の第1項の δ 関数は寄与しなくなり，また，上の仮定より，

$$|c_p(\infty)|^2dp=|2\pi\langle p|\hat{V}|p_0\rangle|^2\cdot\left|\int dq\ \delta(E_p-E_q)c_q(-\infty)\right|^2dp \tag{9.158}$$

と書ける．ところで，この式の右辺の第2因子は，物理的に明確な意味をもっている．実際，以下の例題で示すように，

$$\left|\int dq\ \delta(E_p-E_q)c_q(-\infty)\right|^2=\frac{1}{v}\delta(E_p-E_{p_0}) \tag{9.159}$$

としてよいことがわかる．ここで v は波束の速度であり，

$$v=\left.\frac{\partial E}{\partial p}\right|_{p=p_0}=\frac{p_0}{m} \tag{9.160}$$

で与えられる．

例題3　(9.159)を示せ．

解　$c_q(-\infty)$ は $q=p_0$ の付近に鋭いピークをもつとしているから，$\int dq\ \delta(E_p-E_q)c_q(-\infty)$ は p の関数として，$p=\pm p_0$ の付近に鋭いピークをもつ．(9.158)における p 積分は，そのピークの幅よりも大きい領域にわたるものとすれば，(9.158)の第2因子は，$\delta(E_p-E_{p_0})$ に比例するものでおきかえてもよい．比例係数を求めるために，まず，

$$\begin{aligned}&\left|\int dq\ \delta(E_p-E_q)c_q(-\infty)\right|^2\\&=\int dq\ dq'\ \delta(E_p-E_q)\ \delta(E_p-E_{q'})c_q(-\infty)c_{q'}^*(-\infty)\\&=\int dq\ dq'\ \delta(E_p-E_q)\ \delta(E_q-E_{q'})c_q(-\infty)c_{q'}^*(-\infty)\end{aligned}$$

と書く．つぎに，$c_q(-\infty)$ が $q=p_0$ 付近だけでゼロでないことに注意すると，

$$\int dq'\ \delta(E_q-E_{q'})c_{q'}^*(-\infty)=\frac{1}{\dfrac{\partial E_q}{\partial q}}c_q^*(-\infty)\simeq\frac{1}{v}c_q^*(-\infty)$$

がわかるから，けっきょく，

$$\begin{aligned}&\left|\int dq\ \delta(E_p-E_q)c_q(-\infty)\right|^2\\&\simeq\int dq\ \delta(E_p-E_q)\frac{1}{v}c_q(-\infty)c_q^*(-\infty)\\&\simeq\frac{1}{v}\ \delta(E_p-E_{p_0})\int dq\ c_q(-\infty)c_q^*(-\infty)\\&=\frac{1}{v}\ \delta(E_p-E_{p_0})\end{aligned}$$

を得る．ここで，第2行から第3行への変形は，p について十分大きい領域で積分す

るものとしたときに成り立つことに注意しよう． ▮

上で得られた(9.159)を(9.158)に代入すると，

$$|c_p(\infty)|^2 dp = \frac{2\pi}{v} 2\pi\delta(E_p - E_{p_0})|\langle p|\hat{V}|p_0\rangle|^2 dp \qquad (p\sim -p_0) \qquad (9.161)$$

となるが，p について $-p_0$ のまわりで積分すると，反射する確率 R が得られる．

$$R = \int |c_p(\infty)|^2 dp \quad (\text{積分は } p=-p_0 \text{ の付近})$$
$$= \left(\frac{2\pi}{v}\right)^2 |\langle p|\hat{V}|p_0\rangle|^2 \qquad (9.162)$$

ここで，

$$\int dp\ \delta(E_p - E_{p_0}) \quad (\text{積分は } p=-p_0 \text{ の付近})$$
$$= \left|\frac{1}{\left.\frac{\partial E_p}{\partial p}\right|_{p=-p_0}}\right| = \frac{1}{v} \qquad (9.163)$$

を使った．

例題 1　(9.162)の右辺は確率の次元，すなわち無次元の量であることを確かめよ．

解　$|p\rangle$ は規格化条件

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$$

をみたしているから，運動量の $-\frac{1}{2}$ 乗の次元をもつ．

よって，$\langle p|\hat{V}|p_0\rangle$ は(エネルギー)/(運動量)すなわち速度の次元をもつ．よって，(9.162)の右辺は無次元量である． ▮

以上のように，散乱問題では，波束を考えることによって自然に摂動論を適用することができるが，結果の表式が単純なわりに，議論が少しこみ入っていた．多少ごまかしのきらいはあるが，もっと単純な議論で(9.161)を得る方法を説明しておこう．議論の出発点として，(9.147)を平面波間の単位時間あたりの遷移確率に適用しよう．すなわち，はじめに運動量 p_0 をもっていた平面波が，摂動の影響で運動量が p の平面波に遷移する確率は，$p\neq p_0$ のとき単位時間あたり，

$$dw_{p_0\to p} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_p - E_{p_0})|\langle p|\hat{V}|p_0\rangle|^2 dp \qquad (p\neq p_0) \qquad (9.164)$$

であることになる．ところで，(9.147)のすぐあとに説明したように，$|p_0\rangle$ は連続準位に属しているから，(9.164)をそのまま確率と解釈するわけにはいかない．しかし，平面波 $|p\rangle$ がいままでと同様に，$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$ のように規格化されているとすると，

$$\langle x | p_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \tag{9.165}$$

であるから，平面波 $|p_0\rangle$ は，確率密度流

$$f = \frac{v}{2\pi\hbar} \tag{9.166}$$

をもっている．これを，単位時間あたりにポテンシャル障壁に向かっていく粒子の数と解釈することにすると，1回の散乱で反射される確率は，(9.164)と(9.166)の比として，

$$\frac{dw_{p_0 \to p}}{f} = \frac{2\pi}{v} \cdot 2\pi\, \delta(E_p - E_{p_0}) |\langle p | \hat{V} | p_0 \rangle|^2 dp \qquad (p \sim -p_0) \tag{9.167}$$

で与えられることになるが，これは，(9.161)と一致している．ここでは1次元の場合を考えたが，3次元の場合でも，散乱の確率あるいは散乱断面積を手っとり早く求めるためには，平面波に対して(9.147)を適用してしまって，それを適当に確率密度流でわってやればよいことが同様な議論によってわかる．このように，(9.147)はたいへん便利な公式であり，Fermiの黄金則とよばれている．

9.6 断　熱　因　子

前節の351ページの(b)では，時間によらない摂動による連続準位間の遷移を議論したが，その場合の摂動の高次について考えよう．具体的には，前節と同様に，波束の散乱を扱うことにする．波束は無限の過去または無限の未来では，摂動のポテンシャルから十分に離れているので，その波動関数は非摂動ハミルトニアンに従って時間発展していると考えてよい．もう少し一般的にいうと，いま考えているような状況では，全ハミルトニアンをうまく分解して，

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{9.168}$$

とすると，適当な波束に対しては，十分に過去あるいは未来における時間発展は $\hat{H}_0$ だけで決まるとしてよい．いいかえると，ε を正の小さな数として全ハミルトニアンを，

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} e^{-\varepsilon|t|} \tag{9.169}$$

のように変えてしまっても，ε が十分小さければ，波束の散乱に対する答は変わらない．すなわち，この場合，有限の ε に対して計算をし，最後に $\varepsilon \to 0$ の極限をとっても正しい答が得られる．このように，摂動 $\hat{V}$ に計算の便宜上かける因子 $e^{-\varepsilon|t|}$ を断熱因子とよんでいる．以下でみるように，断熱因子を導入することにより，波束の時間発展を簡単に表すことができる．

いま，相互作用表示で波束の波動関数が，(時間)→$-\infty$ のとき，

$$|\psi(t=-\infty)\rangle_{\mathrm{I}}=\int d\nu\, c_\nu(-\infty)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle \tag{9.170}$$

で与えられているとしよう．ここで，$|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ は $\hat{H}_0$ の固有値 E_ν の固有ベクトルであり，$\hat{H}_0$ は連続準位しかもたないとする．波動関数が時刻 $t=0$ でどのようになるかを考えよう．単純に，(9.125)を適用すると，

$$\begin{aligned}c_\nu(0)=&c_\nu(-\infty)+\frac{1}{i\hbar}\int d\nu'\int_{-\infty}^{0}dt'\,V_{\nu\nu'}(t')c_{\nu'}(-\infty)\\&+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int d\nu'\int d\nu''\int_{-\infty}^{0}dt'\int_{-\infty}^{t'}dt''\,V_{\nu\nu'}(t')V_{\nu'\nu''}(t'')c_{\nu''}(-\infty)\\&+\cdots\cdots\end{aligned} \tag{9.171}$$

となるが，断熱因子を導入しなければ，この式の積分は必ずしも一意的に定義されていない．すなわち，断熱因子なしで単純に，

$$V_{\nu\nu'}(t)=\exp[-i(\omega_{\nu'}-\omega_\nu)t]\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu'}^{(0)}\rangle \tag{9.172}$$

とすると，(9.171)の右辺に現れる時間積分は，積分の下端で振動しており，このままでは定義されない．なぜこのようなことが起こるのかは，つぎのように考えればわかる．われわれが本当に扱いたいのは波束の時間発展であり，波束に対して摂動の効果は(時間)→$-\infty$ で十分にはやく消える．ところが，波束を $\hat{H}_0$ の固有関数の重ね合わせで表すと，各固有関数は局在した波束ではないから，(時間)→$-\infty$ で摂動の効果が消えるとはいえない．すなわち，上のような問題は，(9.171) で ν'，$\nu''\cdots$ に関する積分と t'，$t''\cdots$ に関する積分を不注意に交換したことから生じたものであるといえる．もし，はじめに ν'，$\nu''\cdots$ に関する積分を行えば，t'，$t''\cdots$ に関する積分はきちんと収束しているはずである．ところが，実際の計算を行うためには，はじめに t'，$t''\cdots$ で積分できたほうがはるかに便利である．断熱因子を導入すると，このような積分の順序の交換が許されることはすぐにわかる．すなわち，断熱因子を入れると，(9.172)のかわりに，

$$V_{\nu,\nu'}(t)=\exp[-i(\omega_{\nu'}-\omega_\nu)t-\varepsilon|t|]\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu'}^{(0)}\rangle \tag{9.173}$$

となり，これは $t\to-\infty$ で十分はやく減少しているからである．

実際，(9.171)に(9.173)を代入して積分を実行すると[1]，

$$c_\nu(0)=c_\nu(-\infty)+\int d\nu'\frac{\langle\varphi_\nu^{(0)}|\hat{V}|\varphi_{\nu'}^{(0)}\rangle}{E_{\nu'}-E_\nu+i0}c_{\nu'}(-\infty)$$

1) $\lim\limits_{\varepsilon\to+0}\dfrac{1}{x+i\varepsilon}$ のことを簡単のため $\dfrac{1}{x+i0}$ と書くことにする．

$$+\int d\nu' \int d\nu'' \frac{\langle \varphi_\nu^{(0)} | \hat{V} | \varphi_{\nu''}^{(0)} \rangle}{E_{\nu''} - E_\nu + i0} \frac{\langle \varphi_{\nu''}^{(0)} | \hat{V} | \varphi_{\nu'}^{(0)} \rangle}{E_{\nu''} - E_{\nu'} + i0} c_{\nu''}(-\infty)$$
$$+\cdots \tag{9.174}$$

となり，不定性なく計算することができる．$c_\nu(0)$ を使うと，相互作用表示での波動関数の $t=0$ における値は，

$$|\psi(t=0)\rangle_{\mathrm{I}} = \int d\nu\ c_\nu(0) | \varphi_\nu^{(0)} \rangle \tag{9.175}$$

と書けるはずであるが，(9.174) によって $c_\nu(0)$ を $c_\nu(-\infty)$ で表すと，これは，

$$|\psi(t=0)\rangle_{\mathrm{I}} = \int d\nu\ c_\nu(-\infty) | \varphi_\nu ; \mathrm{in} \rangle \tag{9.176}$$

とも書けるはずである．実際に，(9.174) を (9.175) に代入して，(9.176) の形にまとめることにより，

$$|\varphi_\nu ; \mathrm{in}\rangle = |\varphi_\nu^{(0)}\rangle + \int d\nu' \frac{|\varphi_{\nu'}^{(0)}\rangle\langle \varphi_{\nu'}^{(0)} | \hat{V} | \varphi_\nu^{(0)} \rangle}{E_\nu - E_{\nu'} + i0}$$
$$+\int d\nu' \int d\nu'' \frac{|\varphi_{\nu''}^{(0)}\rangle\langle \varphi_{\nu''}^{(0)} | \hat{V} | \varphi_{\nu'}^{(0)} \rangle}{E_\nu - E_{\nu''} + i0} \frac{\langle \varphi_{\nu'}^{(0)} | \hat{V} | \varphi_\nu^{(0)} \rangle}{E_\nu - E_{\nu'} + i0}$$
$$+\cdots \tag{9.177}$$

が得られる．(9.170) と (9.176) を見くらべるとわかるように，形式的には，$t=-\infty$ で $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ であった状態は $t=0$ で $|\varphi_\nu ; \mathrm{in}\rangle$ という状態になるということができる．もちろん，物理的には波束を考えているわけであり，$t=-\infty$ で $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ を重ね合わせてつくられる波束が $t=0$ まで時間発展すると，$|\varphi_\nu ; \mathrm{in}\rangle$ を同じ係数で重ね合わせることにより得られる状態になる，という意味に解釈しなければならない．

ところで，相互作用表示における時間発展が (9.75) のように積分形で表されることを思い出すと，上の結果は，

$$|\varphi_\nu ; \mathrm{in}\rangle = \lim_{\varepsilon \to +0} T \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{0} dt'\ \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right) | \varphi_\nu^{(0)} \rangle \tag{9.178}$$

と書けることは明らかであろう．ここで，$V_{\mathrm{I}}(t)$ は断熱因子をつけた摂動ハミルトニアンであり，

$$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t) = e^{-\varepsilon|t|} \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar} t \right) \hat{V} \exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar} t \right) \tag{9.179}$$

である．同様にして，$t \to +\infty$ で形式的に $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ になる状態が $t=0$ で $|\varphi_\nu ; \mathrm{out}\rangle$ で表されるとすると，

$$|\varphi_\nu ; \mathrm{out}\rangle = \left\{ \lim_{\varepsilon \to +0} T \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt'\ \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right) \right\}^{-1} | \varphi_\nu^{(0)} \rangle \tag{9.180}$$

と書けることがわかる．

例題 1 (9.180)を示せ.

解 $t=0$ で $|\varphi_\nu;\mathrm{out}\rangle$ であったものが $t=+\infty$ で $|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ になるわけであるから,

$$|\varphi_\nu^{(0)}\rangle=\lim_{\varepsilon\to+0}T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')\right)|\varphi_\nu;\mathrm{out}\rangle$$

がわかる. これより, (9.180) は明らか. ▮

上で導入した $|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle$ や $|\varphi_\nu;\mathrm{out}\rangle$ を使うと, 摂動による波束間の遷移をすっきりとした形で表すことができる. $t\to-\infty$ で $\int d\nu\, f(\nu)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ のような始状態の波束が $t\to+\infty$ で $\int d\nu\, g(\nu)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$ のような終状態の波束に遷移する確率振幅を考えよう. 上で述べたことより, いま考えている始状態の波束は, $t=0$ では,

$$|f;\mathrm{in}\rangle=\int d\nu\, f(\nu)|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle \tag{9.181}$$

となっているはずである. 同様に, 終状態の波束は, $t=0$ では,

$$|g;\mathrm{out}\rangle=\int d\nu\, g(\nu)|\varphi_\nu;\mathrm{out}\rangle \tag{9.182}$$

と書けるはずであるから, 求める確率振幅は,

$$\begin{aligned}\langle g;\mathrm{out}|f;\mathrm{in}\rangle&=\int d\nu'\int d\nu\, g^*(\nu')\langle\varphi_{\nu'};\mathrm{out}|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle f(\nu)\\&=\int d\nu'\int d\nu\, g^*(\nu')S_{\nu',\nu}f(\nu)\end{aligned} \tag{9.183}$$

と書ける. ここで, $S_{\nu',\nu}$ は,

$$S_{\nu',\nu}=\langle\varphi_{\nu'};\mathrm{out}|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle \tag{9.184}$$

により定義され, S-行列とよばれているが, (9.178)と(9.180)を使うと,

$$S_{\nu',\nu}=\langle\varphi_{\nu'}^{(0)}|\hat{S}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle \tag{9.185a}$$

$$\hat{S}=\lim_{\varepsilon\to+0}T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^\infty dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')\right) \tag{9.185b}$$

と書けることがわかる.

例題 2 (9.185)を導き, S-行列がユニタリーであることを示せ.

解 (9.180)の両辺のエルミート共役をとると,

$$\langle\varphi_{\nu'};\mathrm{out}|=\lim_{\varepsilon\to+0}\langle\varphi_{\nu'}^{(0)}|\,T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')\right)$$

が得られる. これと, (9.178)より(9.185)は明らかであろう. ところで, $\hat{V}_\mathrm{I}(t)$ はエルミートであるから,

$$T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^\infty dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')\right)$$

はユニタリーであり，当然 $\hat{S}$ はユニタリーである． ▮

［問題4］ (1) (9.177) で与えられた $|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle$ は，

$$|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle=\left(1+\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}+\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}+\cdots\right)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle \quad ①$$

と書けることを示せ．

(2) $|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle$ は，全ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値 E_ν の固有関数であること，すなわち

$$\hat{H}|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle=E_\nu|\varphi_\nu;\mathrm{in}\rangle$$

を示せ．

(3) $|\varphi_\nu;\mathrm{out}\rangle$ については，上の(1)，(2)はどうなるか．

［解］ (1) ①に，$\int d\nu|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\langle\varphi_\nu^{(0)}|=1$ を挿入して行列要素で具体的に書いたものが(9.177)にほかならない．

(2) ①の高次の項を求めるために，まず(9.178)を，

$$\begin{aligned}&T\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0}dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')\right)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\\&=|\varphi_\nu^{(0)}\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0}dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\\&\quad+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{0}dt''\,\hat{V}_\mathrm{I}(t'')\int_{-\infty}^{t''}dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\\&\quad+\cdots\end{aligned}$$

のように展開する．ところが，$t<0$ のとき

$$\begin{aligned}\hat{V}_\mathrm{I}(t)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle&=e^{\varepsilon t}\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)\hat{V}\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t\right)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\\&=\exp\left[\frac{1}{i\hbar}(E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon)t\right]\hat{V}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\end{aligned}$$

であるから，

$$\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')|\varphi_\nu^{(0)}\rangle=\exp\left[\frac{1}{i\hbar}(E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon)t\right]\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon}\hat{V}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

となる．これを使うと，

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{t}dt''\,V_\mathrm{I}(t'')\int_{-\infty}^{t''}dt'\,\hat{V}_\mathrm{I}(t')|\varphi_\nu^{(0)}\rangle\\&=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt''\,e^{\varepsilon t''}\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t''\right)\hat{V}\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{i\hbar}t''\right)\cdot\end{aligned}$$

$$\cdot \exp\left[\frac{1}{i\hbar}(E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon)t''\right]\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon}\hat{V}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt''\exp\left[\frac{1}{i\hbar}(E_\nu-\hat{H}_0+2i\hbar\varepsilon)t''\right]\hat{V}\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon}\hat{V}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

$$=\exp\left[\frac{1}{i\hbar}(E_\nu-\hat{H}_0+2i\hbar\varepsilon)t\right]\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+2i\hbar\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i\hbar\varepsilon}\hat{V}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

が得られ，同様にして順に高次の項も計算できる．一般に分母には，$i\hbar\varepsilon$, $2i\hbar\varepsilon$, … が現れるが，どれも $\varepsilon\to 0$ では $i0$ と書くことにすると，結果は，

$$|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{in}\rangle=\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}\right)^k|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

と表せる．これは等比級数であるから，たし上げると

$$|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{in}\rangle=\frac{1}{1-\dfrac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

となる．両辺に $E_\nu-\hat{H}=E_\nu-\hat{H}_0-\hat{V}$ をかけると，

$$(E_\nu-\hat{H})|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{in}\rangle=(E_\nu-\hat{H}_0-\hat{V})\frac{1}{1-\dfrac{1}{E_\nu-\hat{H}_0+i0}\hat{V}}|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

$$=(E_\nu-\hat{H}_0)|\varphi_\nu^{(0)}\rangle=0$$

が得られる．(この式の意味については第12章9節を参照せよ．)

(3) (9.180) より $|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{out}\rangle$ を求めると，①の右辺で $+i0$ を $-i0$ におきかえたもの，すなわち，

$$|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{out}\rangle=\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{1}{E_\nu-\hat{H}_0-i0}\hat{V}\right)^k|\varphi_\nu^{(0)}\rangle$$

が得られる．これはやはり，

$$\hat{H}\,|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{out}\rangle=E_\nu|\varphi_\nu\,;\,\mathrm{out}\rangle$$

をみたす．　∎

第9章　章　末　問　題

[1]　弱い周期ポテンシャルをもつ1次元系のハミルトニアン

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$$

を考える．ここで，$V(x)$ は周期 a をもつ，すなわち $V(x+a)=V(x)$ であるとする．

このとき，よく知られているように，並進の演算子 $\hat{U}=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right)$ は $\hat{H}$ と可換である．$\hat{U}$ の固有値を $e^{ika}\left(\text{ただし，}-\frac{\pi}{a}\leqq k\leqq\frac{\pi}{a}\right)$ と書き，各 k の値に対するエネルギー準位を考えよう．

(1) $V(x)=0$ のときエネルギー準位は図1のようになることを示せ．

(2) $V(x)\neq 0$ のときは，図1のA，Bの付近のふるまいはどのように変化するか．$V(x)$ を摂動として扱い議論せよ．

［解］ (1) $V(x)=0$ のときは自由粒子であるから，もちろん運動量 $\hat{p}$ じしんが保存する．$\hat{p}$ の固有値を $\hbar k'$ とすると，エネルギーは $\frac{\hbar^2}{2m}k'^2$ である．これらのうちで，$\hat{U}$ の固有値が e^{ika} であるものは，

$$k'=k+\frac{2\pi}{a}n \qquad (n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$$

であるから，図1は放物線 $E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$ を横軸方向に平行移動して，$-\frac{\pi}{a}\leqq k\leqq\frac{\pi}{a}$ のなかに収めたものとして得られる．

(2) ポテンシャル $V(x)$ を Fourier 級数に展開して，

$$V(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c_n\exp\left(i\frac{2\pi}{a}nx\right),\quad c_{-n}=c_n^*$$

と表すと，運動量表示のケット $|p\rangle$ に対して，

$$V(\hat{x})|p\rangle=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c_n\left|p+\frac{2\pi\hbar}{a}n\right\rangle=c_0|p\rangle+\cdots \tag{a}$$

となる．よって，大まかにいうと V に関する1次の摂動でエネルギー準位は c_0

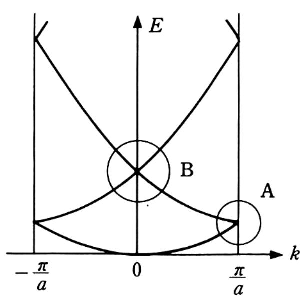


図1

だけ変化する．しかし，図1のAやBのようなところでは，非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ に縮退があるため注意を要する．

(i) Aの付近 $\left(k=\dfrac{\pi}{a}-\varepsilon\right.$ とする$\left.\right)$

Aの付近では，摂動が加わる前，下の枝は $|\varphi_{下}\rangle=\left|\hbar\left(\dfrac{\pi}{a}-\varepsilon\right)\right\rangle$ であり，上の枝は $|\varphi_{上}\rangle=\left|\hbar\left(-\dfrac{\pi}{a}-\varepsilon\right)\right\rangle$ である．これらの2つの状態の $\hat{H}_0$ の固有値は，それぞれ，

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}-\varepsilon\right)^2=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi}{a}\varepsilon+O(\varepsilon^2)$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\pi}{a}-\varepsilon\right)^2=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi}{a}\varepsilon+O(\varepsilon^2) \qquad ⓑ$$

であり，ε がゼロの極限で縮退している．よって，Aの付近でのエネルギー準位のふるまいを調べるためには，これら2つの状態が混ざり合うことを考慮する必要がある．そのためには，ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ をこれら2つの状態ではられる空間に射影したものを考えればよい．$V(\hat{x})$ を $|\varphi_{下}\rangle$ や $|\varphi_{上}\rangle$ に作用させると，一般にはⓐの右辺のように無限個の項が現れるが，このうちで $|\varphi_{下}\rangle$ と $|\varphi_{上}\rangle$ に比例するものだけを残すと，

$$V(\hat{x})|\varphi_{下}\rangle=c_0|\varphi_{下}\rangle+c_{-1}|\varphi_{上}\rangle$$
$$V(\hat{x})|\varphi_{上}\rangle=c_0|\varphi_{上}\rangle+c_1|\varphi_{下}\rangle \qquad ⓒ$$

となるから，けっきょく

$$\hat{H}|\varphi_{下}\rangle=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+c_0-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi}{a}\varepsilon\right)|\varphi_{下}\rangle+c_{-1}|\varphi_{上}\rangle$$
$$\hat{H}|\varphi_{上}\rangle=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+c_0+\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi}{a}\varepsilon\right)|\varphi_{上}\rangle+c_1|\varphi_{下}\rangle$$

と書けることがわかる．これは2行2列の行列として，

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+c_0\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}-\dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{\pi}{a}\varepsilon & c_{-1}\\ c_1 & \dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{\pi}{a}\varepsilon\end{pmatrix}$$

であるから，容易に対角化でき，2つの固有値は，

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+c_0\right)\pm\sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi}{a}\right)^2\varepsilon^2+|c_1|^2}$$

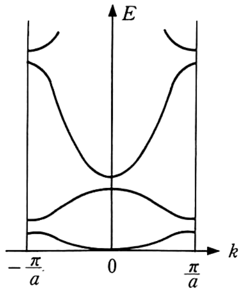


図2

で与えられる.

(ii) 図1のBの付近も同様である. この場合, $k=\varepsilon$ のところでは, $|\hbar(\frac{2\pi}{a}+\varepsilon)\rangle$ と $|\hbar(-\frac{2\pi}{a}+\varepsilon)\rangle$ という2つの状態が混ざりうる. これらの状態の運動量が $2\cdot\frac{2\pi\hbar}{a}$ だけ違っていることに注意して, ⓒ以下の議論を繰り返すと, $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ の2つの固有値が

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2+c_0\right)\pm\sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{2\pi}{a}\right)^2\varepsilon^2+|c_2|^2}$$

で与えられることがわかる.

以上の結果を図示すると, エネルギー準位は図2のようになる.

ここでの議論からわかるように, 一般に, 図1のAやBのようにエネルギー準位を表す線が交差するとき, その間の遷移を生み出すような摂動を加えると, その交差は解消されて図2のようにギャップができる.

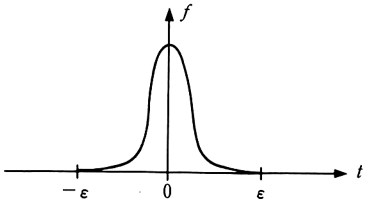
[2] 瞬間的に作用する摂動, すなわち撃力を分析するために, ハミルトニアンとして,

$$\hat{H}=\hat{H}_0+f(t)\hat{V}$$

の形のものを考えよう. ここで, $\hat{H}_0$, $\hat{V}$ は陽に時間 t を含まず, $f(t)$ は図のように $t=0$ のまわりの短い時間 $(|t|<\varepsilon)$ でのみゼロでないとする.

(1) ε が十分小さいとき, $t=\varepsilon$ における状態ベクトル $|\varphi(\varepsilon)\rangle$ は $t=-\varepsilon$ における状態ベクトル $|\varphi(-\varepsilon)\rangle$ を使って,

$$|\varphi(\varepsilon)\rangle=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\int_{-\infty}^{\infty}f(t')dt'\right)\hat{V}\right]|\varphi(-\varepsilon)\rangle \quad ①$$



と書けることを示せ．

(2) 1次元調和振動子に力積が F_0 であるような撃力 $F(t)=F_0\delta(t)$ が作用する場合のハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2-\delta(t)F_0\hat{x}$$

と書ける．$t<0$ で基底状態にあったとき，$t>0$ でも基底状態にとどまっている確率を求めよ．

［解］ (1) Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle=(\hat{H}_0+f(t)\hat{V})|\varphi(t)\rangle$$

による時間発展を考える際に，十分小さい時間間隔 $-\varepsilon<t<\varepsilon$ では，右辺の $\hat{H}_0$ は無視してもよいので，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle=f(t)\hat{V}|\varphi(t)\rangle$$

を考えれば十分である．これを解くと

$$|\varphi(t)\rangle=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\int_{t_0}^{t}f(t')dt'\right)\hat{V}\right]|\varphi(t_0)\rangle$$

となるが，この式で $t=\varepsilon$，$t_0=-\varepsilon$ としたものが①にほかならない．

(2) 調和振動子の基底状態を $|\varphi_0\rangle$ と書くと，題意より $|\varphi(-\varepsilon)\rangle=|\varphi_0\rangle$ であるから，①を使うと，

$$|\varphi(\varepsilon)\rangle=\exp\left(\frac{i}{\hbar}F_0\hat{x}\right)|\varphi_0\rangle \qquad ⓐ$$

となる．右辺の第1因子 $\exp\left(\frac{i}{\hbar}F_0\hat{x}\right)$は，運動量を F_0 だけ増加させる演算子にほかならないから，ⓐは激力の物理的描像と一致している．生成・消滅演算子

$$\hat{a}=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$$

$$\hat{a}^\dagger=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$$

を使うと，

$$\hat{x}=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$$

であるから，ⓐは，

$$|\varphi(\varepsilon)\rangle=\exp\left[\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}F_0(\hat{a}^\dagger-\hat{a})\right]|\varphi_0\rangle \qquad ⓑ$$

と書ける．

$[\hat{A},\ \hat{B}]$ が c 数であるときの恒等式

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$$

を使うと，ⓑは，

$$\begin{aligned}|\varphi(\varepsilon)\rangle&=\exp\left(-\frac{F_0{}^2}{4m\hbar\omega}\right)\exp\left(\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}F_0\hat{a}^\dagger\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}F_0\hat{a}\right)|\varphi_0\rangle\\&=\exp\left(-\frac{F_0{}^2}{4m\hbar\omega}\right)\exp\left(\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}F_0\hat{a}^\dagger\right)|\varphi_0\rangle \qquad ⓒ\end{aligned}$$

と書ける．ここで，最後の変形では $\hat{a}|\varphi_0\rangle=0$ を使った．ⓒは，$|\varphi(\varepsilon)\rangle$ がコヒーレント状態であることを示している．この式から $t>0$ で基底状態 $|\varphi_0\rangle$ にとどまる確率は，

$$|\langle\varphi_0|\varphi(\varepsilon)\rangle|^2=\exp\left(-\frac{F_0{}^2}{2m\hbar\omega}\right)$$

で与えられることがわかる．

第10章　WKB法(準古典的近似法)

WKB法はポテンシャルが1次元でゆるやかに変化している場合に適用できる近似法である(3次元の場合にも，ポテンシャルが球対称の場合には動径部分の波動関数に適用可能)．定常状態の波動関数を $\varphi(x)=\exp[iS(x)/\hbar]$ とおいて，$S(x)$ を $\hbar$ のべき級数に展開して，最初の2つの項まで近似する方法を**WKB近似**という．このようにすると，$\hbar\to 0$ の極限で，量子力学から古典力学に移行することがよくわかる(10.1節)．しかし，WKB近似の波動関数は回帰点を含む微小区間では適用できないので(10.2節)，この近傍では，正確な1次元Schrödinger方程式を解いて，両側に接続しなければならない(10.3節)．これを1次元ポテンシャルのなかを運動している粒子の定常状態に適用することにより，Bohr-Sommerfeld(10.4節) の量子関係を導く．また，ポテンシャルの壁をトンネル効果によって透過する確率をも求めよう (10.5節)．

10.1　量子力学より古典力学への移行

量子力学より古典力学への極限は，波動光学より幾何光学への極限と形式的に似ている．この類似性は，量子力学の建設へと導いた初期の仕事で利用された．

量子力学より古典力学への移行の条件を調べるには，波動関数を，

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\boldsymbol{r}, t)\right] \tag{10.1}$$

の形に書くと便利である．ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかで質量 m をもった粒子の運動を記述する Schrödinger 方程式に（10.1）を代入すると S はつぎの方程式をみたしている．

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})-\frac{i\hbar}{2m}\Delta S \tag{10.2}$$

この式で $\hbar\to 0$ の極限をとると，（10.2）の方程式は，S に対する Hamilton-Jacobi の方程式

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}) \tag{10.3}$$

に帰着する．つまり，$\hbar\to 0$ の極限で，量子力学より古典力学への移行が行われていることがわかる．

10.2　準古典近似

準古典近似とは，S に対する量子力学的方程式（10.2）を解くための近似法である．基本的なアイデアは簡単である．いま，時間に依存しない1次元の Schrödinger 方程式[1)]

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\varphi(x)=0 \tag{10.4}$$

を考えよう．定常状態の波動関数を，

$$\varphi(x)=\exp\left(\frac{iS(x)}{\hbar}\right) \tag{10.5}$$

とおいて（10.4）に代入すると，$S(x)$ は，

$$S'^2-i\hbar S''-2m[E-V(x)]=0 \tag{10.6}$$

をみたすことがわかる．$\hbar$ が小さいから，

1)　この方法は，3次元の問題においてもポテンシャルが球対称である場合には適用可能である．

$$S=S_0+\frac{\hbar}{i}S_1+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2+\cdots \tag{10.7}$$

と $\hbar$ のべき展開をして，最初の数項をとって $S(x)$ を近似的に求めることができる．**Wentzel-Kramers-Brillouin 近似**（略して **WKB 近似**）とは，1 次元の場合について，S を $\hbar$ のべきに展開し，古典的な表式よりも 1 つだけ多い最初の 2 つの項($\hbar$ の 1 次まで）を求めることにほかならない．ゆえに，準古典近似ともいう．

(10.7) を (10.6) に代入し，$\hbar$ の各べきの係数を等しくおくことにより得られる連立微分方程式

$$\begin{aligned} S_0'^2 &= 2m[E-V(x)]=[p(x)]^2 \\ 2S_1' &= -\frac{S_0''}{S_0'} \\ 2S_2' &= -\frac{S_1'^2+S_1''}{S_0'} \\ &\vdots \qquad\qquad \vdots \end{aligned} \tag{10.8}$$

から，S_0，S_1，S_2，…が順次決定できる．実際，第 1 式より

$$S_0'=\pm p(x) \tag{10.9}$$

が得られ，これと第 2 式より $2S_1'=-p'(x)/p(x)$ すなわち，

$$S_1=-\frac{1}{2}\ln p(x)+\text{const.} \tag{10.10}$$

を得る．(10.9) を x で積分すると S_0 が得られる．したがって，$E>V(x)$ である領域（古典論で許される領域）での一般解は，

$$\varphi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{p}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx\right]+\frac{c_2}{\sqrt{p}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx\right] \tag{10.11}$$

となる．この波動関数の振幅は $1/\sqrt{p}$ に比例するので，$(x,\ x+dx)$ の間に粒子を見い出す確率は，本質的に $1/p$ に比例する．すなわち，古典粒子の速度に反比例する．われわれの近似では，確率の流れは $|\varphi(x)|^2 p(x)$(＝定数) だから，この結果は確率の保存則を表していることになる．

例題 1　WKB 近似がいい近似であるための条件を求めよ．

解　(10.8) の各式から，S_0'，S_1'，…が決まり，それを積分することによって S_0，S_1，…が決まる．しかし，その際の積分定数は，物理的意味をもたないことに注意しよう．なぜならば，そのような定数は，波動関数全体にかかる因子の不定性に吸収されてしまうからである．よって，ここで行っている近似が有効であるための条件は，$S'=S_0'+\frac{\hbar}{i}S_1'+\cdots$ の第 2 項が第 1 項に比べて十分に小さいことである．ゆえ

に，$S_0' \gg \frac{\hbar}{i} S_1'$ がその条件で，(10.8) の第2式を使えば，

$$1 \gg \hbar \left| \frac{S_0''}{S_0'^2} \right| \text{ すなわち，} 1 \gg \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \tag{10.12}$$

と書きかえることができる．すなわち，長さ $\lambda/2\pi$ あたりの波長の変化は，その波長に比べて十分小さくなければならない．そのためには x の関数として，ポテンシャル $V(x)$ がゆっくりと変化していればよい．　■

$E < V(x)$ の領域は，古典的には許されない運動領域である．この領域では，$p(x)$ は虚数の関数である．実関数 $\rho(x) = \sqrt{2m[V(x) - E]}$ を用いて，$p(x) = i\rho(x)$ とおけば，(10.11) は，

$$\varphi(x) = \frac{d_1}{\sqrt{\rho}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int \rho(x) dx \right] + \frac{d_2}{\sqrt{\rho}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int \rho(x) dx \right] \tag{10.13}$$

と書くことができる．

例題 2　古典的回帰点，すなわち，$V(x) = E$ になる点の近傍では，p および ρ はゼロで，波長は無限大となり，条件 (10.12) が成り立たないことは明らかである．いま，$V(x) = E + \frac{dV}{dx}(x - x_0)$ と直線で近似したとき，WKB 近似がよく成り立つのは $|x - x_0|$ がどの範囲にあるときか．

解　$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \simeq h\left(2m \left| \frac{dV}{dx} \right| |x - x_0| \right)^{-\frac{1}{2}}$ を (10.12) に代入すると，

$$|x - x_0|^{\frac{3}{2}} \gg \frac{\hbar}{2\sqrt{2m}} \left| \frac{dV}{dx} \right|^{-\frac{1}{2}}$$

すなわち，

$$|x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m \left| \frac{dV}{dx} \right|} \right)^{\frac{1}{3}} \tag{ⓐ}$$

を得る．ゆえに，$|x - x_0|$ が上の不等式をみたす領域では，解 (10.11)，(10.13) を使うことができる．　■

10.3　接続公式

前節でみたように，回帰点 x_0 を含む長さ $\left(\frac{\hbar^2}{m \left| \frac{dV}{dx} \right|} \right)^{\frac{1}{3}}$ の微小区間では，WKB 近似は適用できず，したがって1次元 Schrödinger 方程式を正確に解く必要がある．

振動解 (10.11) と指数解 (10.13) の関係がどのように接続されるべきかを知るためには，正確な解がそれぞれの解に移行するようすを調べてやればよい．接続公式の具体的な形を求めるために，つぎの 2 つの例題を考えよう．

例題 1 一様な外場のなかにおかれた粒子に対する Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}\mp Fx\varphi=E\varphi \qquad ①$$

を解き，エネルギー E のときの波動関数の漸近形を求めよ．

解 (i) $V(x)=-Fx$ $(F>0)$ の場合．エネルギー E は連続スペクトルである．解は $x\to-\infty$ のほうでは指数関数的に減衰し，$x\to\infty$ では無限に振動する．これは，古典的には，坂をころがり落ちる粒子に対応している．Schrödinger 方程式を，

$-\dfrac{d^2\varphi}{dx^2}-\dfrac{2mF}{\hbar^2}\left(x+\dfrac{E}{F}\right)\varphi=0$ と書き，$z\equiv\left(\dfrac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(x+\dfrac{E}{F}\right)$ とおくと，

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2}+z\varphi=0 \qquad ⓐ$$

この微分方程式は，Laplace 変換を用いれば 1 階の微分方程式に帰着し，簡単な積分表示を求めることができる．

付録 C を参照すると，漸近形はつぎのように求まる．

$$\begin{aligned} z\to-\infty \text{ のとき，}\quad &\varphi(z)=\frac{1}{2}\frac{1}{(-z)^{\frac{1}{4}}}\exp\left[-\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}\right] \\ z\to\infty \text{ のとき，}\quad &\varphi(z)=\frac{1}{z^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right) \\ &\qquad=\frac{1}{z^{\frac{1}{4}}}\sin\left(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \qquad ⓑ$$

(ii) $V(x)=Fx$ $(F>0)$ の場合．

$z\equiv\left(\dfrac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(x-\dfrac{E}{F}\right)$ とおくと，Schrödinger 方程式は，

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2}-z\varphi=0 \qquad ⓒ$$

となる．ⓐ で $z\to-z$ とおけば ⓑ より，

$$\begin{aligned} z\to\infty \text{ のとき，}\quad &\varphi(z)=\frac{1}{2}\frac{1}{z^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right) \\ z\to-\infty \text{ のとき，}\quad &\varphi(z)=\frac{1}{(-z)^{\frac{1}{4}}}\sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \qquad ⓓ$$

を得る． ▮

例題 2　10.2 節の例題 2 で議論したように，WKB 近似の波動関数は，$V(x)=E$ となる回帰点のまわりでは近似が悪いが，回帰点から離れたところでは WKB 近似がよく成り立つ．いま，ポテンシャルの変化が十分ゆるやかで，$V(x)=V(a)+V'(a)(x-a)$ $(E=V(a))$ と近似できるとき，

(i) $V'(a)=-F<0$ のとき，$E<V(x)$, $E>V(x)$ となるそれぞれの領域における波動関数は，

$$\frac{c}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a \rho(x')dx'\right] \to \frac{2c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \qquad ①$$

$$(x<a) \qquad\qquad\qquad (x>a)$$

なる接続公式をみたすことを証明せよ．

(ii) $V'(a)=F>0$ のとき，$E>V(x)$, $E<V(x)$ となるそれぞれの領域における波動関数は，

$$\frac{2c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \leftarrow \frac{c}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x \rho(x')dx'\right] \qquad ②$$

$$(x<a) \qquad\qquad\qquad (x>a)$$

なる接続公式をみたすことを証明せよ．

解　(i) $E>V(x)$ の領域では，

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\left(\frac{p(x)}{\hbar}\right)^2\right]\varphi(x)=0,\quad \text{ただし } p(x)=\sqrt{2m[E-V(x)]} \qquad ⓐ$$

$E<V(x)$ の領域では，

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}-\left(\frac{\rho(x)}{\hbar}\right)^2\right]\varphi(x)=0,\quad \text{ただし } \rho(x)=\sqrt{2m[V(x)-E]} \qquad ⓑ$$

の形に書かれる Schrödinger 方程式を解かなければならない．$V(x)=E+V'(a)(x-a)$ と近似すると，$V'(a)=-F$ だから，

$$x>a \text{ のとき，} p(x)=\sqrt{2mF(x-a)} \qquad ⓒ$$

$$x<a \text{ のとき，} \rho(x)=\sqrt{2mF(a-x)} \qquad ⓓ$$

となる．これらを積分すると，

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx'=\frac{2}{3}\left[\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x-a)\right]^{\frac{3}{2}} \qquad ⓔ$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^a \rho(x')dx'=\frac{2}{3}\left[\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(a-x)\right]^{\frac{3}{2}} \qquad ⓕ$$

WKB 近似の波動関数は，$x<a$ の領域で，

$$\varphi(x)=\frac{c}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a \rho(x')dx'\right]$$

$$=\frac{c}{[2mF(a-x)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left[-\frac{2}{3}\left\{\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(a-x)\right\}^{\frac{3}{2}}\right] \qquad ⓖ$$

となる．ここで，ⓓ，ⓕ を用いた．例題1の ⓑ より，

$$-z=\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(a-x),\quad \frac{A}{2}=\frac{c}{(2mF)^{\frac{1}{6}}}\cdot\frac{1}{\hbar^{\frac{1}{6}}} \qquad ⓗ$$

とおくと，$z\to\infty$ のとき，

$$\varphi(x)=\frac{A}{z^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$=\frac{2c}{(2mF)^{\frac{1}{6}}}\frac{1}{\hbar^{\frac{1}{6}}}\frac{1}{\left[\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x-a)\right]^{\frac{1}{4}}}\cos\left[\frac{2}{3}\left\{\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x-a)\right\}^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right]$$

$$=\frac{2c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \qquad ⓘ$$

ここで，右辺第3行目を得るために ⓗ，ⓔ を用いた．したがって，$V'(a)<0$ のとき，①の接続公式が成り立つことがわかった．

(ii) $V'(a)=F>0$ のときには，例題1の ⓓ を使えばよい．実際，

$$x>a \text{ のとき，}\ \rho(x)=\sqrt{2mF(x-a)} \qquad ⓙ$$

$$x<a \text{ のとき，}\ p(x)=\sqrt{2mF(a-x)} \qquad ⓚ$$

これらを積分すると，

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^x \rho(x')dx'=\frac{2}{3}\left[\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x-a)\right]^{\frac{3}{2}}=\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}} \qquad ⓛ$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(x')dx'=\frac{2}{3}\left[\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(a-x)\right]^{\frac{3}{2}}=\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} \qquad ⓜ$$

ゆえに，$x>a$ で指数的に減衰する解

$$\varphi(x)=\frac{c}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x \rho(x')dx'\right] \qquad ⓝ$$

は $x<a$ で振動解

$$\varphi(x)=\frac{2c}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]$$

$$=\frac{2c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \qquad ⓞ$$

につながる．ここで，ⓙ～ⓜ を用いた．したがって，$V'(a)>0$ のとき，②の接続公式をみたすことがわかる．

ここで重要なことを注意しておこう．

①，②の矢印の向きは，$E < V(x)$ の領域にある漸近解は $E > V(x)$ の領域の漸近解に移っていくが，その逆は必ずしも真ではないことを意味している．これは cos の位相に含まれる小さな誤差が，他の領域では増大する指数関数を支配的な項として導入することになるからである．■

10.4　Bohr-Sommerfeld の量子条件

これで準備が完了したので，図 10.1 のような 1 次元ポテンシャルのなかを運動している質量 m の粒子のエネルギー準位を計算しよう．いま，あるエネルギー準位 E に対して，$V(a) = V(b) = E$ であるような古典運動の回帰点が 2 個あるとしよう．回帰点 a，b の近傍で，WKB 近似の適用できない領域を，それぞれ $(a_1,\ a_2)$，$(b_1,\ b_2)$ とする．

領域 $1(x < a_1)$ では，$x \to -\infty$ で $\varphi_1 \to 0$ になる解をとるべきだから，

$$\varphi_1(x) = \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a \rho(x')dx'\right] \tag{10.14}$$

領域 3 $(x > b_2)$ では，解は $x \to \infty$ でゼロになるべきだから，

$$\varphi_3(x) = \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x \rho(x')dx'\right] \tag{10.15}$$

である．領域 $2(a_2 < x < b_1)$ では，(10.11) の形の振動解をもつ．前節の例題 2 の接続条件①を使うと，領域 1→2 への解は，

$$\varphi_2(x) = \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right] \tag{10.16}$$

一方，接続条件②より領域 3→2 への解は，

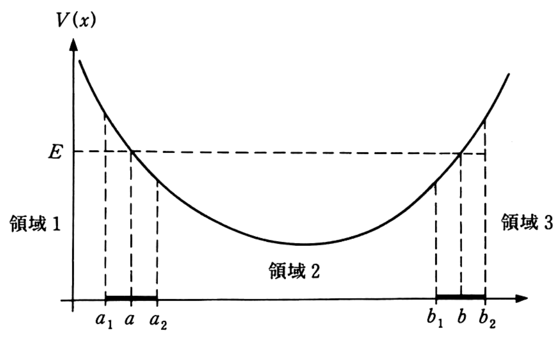


図 10.1　回帰点 a，b をもつ 1 次元のくぼんだポテンシャルへの WKB 法の応用

$$\varphi_2(x)=\frac{2C}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \tag{10.17}$$

となり，両者は一致しなければならない．

例題 1 $a<x<b$ において，(10.16)，(10.17) が一致すると要求することにより，Bohr-Sommerfeld の量子条件が導かれることを示せ．

解 (10.17) より，

$$\varphi_2(x)=\frac{2C}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right]$$
$$=\frac{2C}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}-\eta\right],$$
$$\eta=\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx-\frac{\pi}{2} \tag{ⓐ}$$

ここでもし，条件

$$A=(-1)^n C \tag{ⓑ}$$

および，

$$\eta=\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx-\frac{\pi}{2}=n\pi \quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{ⓒ}$$

がみたされるならば，(10.16) に等しくなることがわかる．したがって，$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$ である．書きかえれば，

$$\oint p(x)dx=2\int_a^b p(x)dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)h \tag{ⓓ}$$

である．これは，$h/2$ の違いはあるが，Bohr-Sommerfeld の量子条件にほかならない． ∎

cos の位相 $\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}$ は，x が a より b まで変化するに従い，ⓓによって $-\pi/4$ から $(n+1/4)\pi$ まで変化する．ゆえに，$\varphi(x)$ はこの区間 (a,b) で n 回ゼロとなる．このように量子数 n は 2 つの回帰点の間の波動関数の節の数をになっている．WKB 法にとっては，各回帰点から数波長離れたところでだけ，漸近解を (10.16)，(10.17) のように展開できるから，この方法がよい近似であるのは，量子数 n の値が十分大きな状態に対してのみである．これは WKB 法が量子数の大きい，ほとんど古典的な極限において最も有用だということである．

例題 2 調和振動子のポテンシャル $V(x)=\frac{m\omega^2x^2}{2}$ のなかの粒子に対するエネルギー固有値を WKB 近似で求めよ．

解
$$p(x)=\left[2m\left(E-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{ⓐ}$$

$p(x)=0$ の解，すなわち $a=-\left(\dfrac{2E}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}}$，$b=\left(\dfrac{2E}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}}$

である．$x=\left(\dfrac{2E}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}}y$ を ⓐ に代入すると，$p(x)=(2mE)^{\frac{1}{2}}(1-y^2)^{\frac{1}{2}}$

$$\therefore \int_a^b p(x)dx=\frac{2E}{\omega}\int_{-1}^{1}(1-y^2)^{\frac{1}{2}}dy=\frac{\pi E}{\omega} \qquad \text{ⓑ}$$

例題 1 より，上式$=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi\hbar$

$$\therefore E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad \text{ⓒ}$$

を得る．これは Schrödinger 方程式を正しく解いて得られた答に一致している．■

10.5　ポテンシャルの壁を透過する確率

接続公式①，②（372 ページ）が用いられる問題のなかでも，最も重要なものの 1 つはポテンシャルの壁をトンネル効果により透過する確率を求める問題であろう．まず，準備としてつぎの例題からはじめよう．

例題 1　2 階線型常微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+f(x)\frac{d}{dx}+g(x)\right]\varphi(x)=0 \qquad \text{①}$$

が 2 つの独立解 $\varphi_1(x)$，$\varphi_2(x)$ をもつとしよう．

(i) ロンスキアン $w(x)\equiv\begin{vmatrix}\varphi_1(x) & \varphi_2(x)\\ \varphi_1'(x) & \varphi_2'(x)\end{vmatrix}$　②

が与えられたとき，$w(x)$ に関する微分方程式を導き，$w(x)$ の形を求めよ．

(ii) とくに①で $f(x)=0$ のとき，$w(x)$ は定数であることを証明せよ．

解　(i) $w(x)$ を x で微分すると，

$$\begin{aligned}w'(x)&=\varphi_1(x)\varphi_2''(x)-\varphi_2(x)\varphi_1''(x)\\&=\varphi_1(x)[-f(x)\varphi_2'(x)-g(x)\varphi_2(x)]-\varphi_2(x)[-f(x)\varphi_1'(x)-g(x)\varphi_1(x)]\\&=-f(x)\,[\varphi_1(x)\varphi_2'(x)-\varphi_2(x)\varphi_1'(x)]\\&=-f(x)\,w(x) \qquad \text{ⓐ}\end{aligned}$$

これが $w(x)$ に関する微分方程式である．

したがって，解は，

$$w(x)=c\exp\left[-\int^x f(x')dx'\right] \qquad \text{ⓑ}$$

となる．

(ii) ⓑ で $f=0$ とおくと，$w(x)$ は定数となる．　■

この例題の(ii)の結果を頭の片隅において，ポテンシャルの壁を透過する確率の問題をWKB法を用いて調べてみよう．

例題 2　図10.2のように，十分なめらかな1次元のポテンシャルの山に左側から粒子が衝突したときの透過係数を，WKB法で評価してみよう．$V(x)=E$ となる点を $x=a$，$b(a<b)$ とし，2つの点は十分離れているものとする．

(1) WKB近似で，障壁を透過した波は，$x>b$ の領域で，

$$\varphi_3(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[i\left\{\frac{1}{\hbar}\int_b^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right\}\right] \quad ①$$

と表されるとし，左側では山の内側に入るにつれて増大する波動関数

$$\varphi_2(x)=\frac{B}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x \rho(x')dx'\right] \quad ②$$

で近似する．10.3節の例題2(i)で考えた波動関数と，この波動関数が独立であることに着目し，例題のロンスキアンを用いて係数 B, C の関係を求めよ．

(2) 領域3から領域2に接続された波動関数を，さらに領域1に接続せよ．

(3) 図のポテンシャルの山を透過する確率を求めよ．

解　(1) 題意より，$x>b$ のとき①が，$x<b$のとき②が与えられているとする．

一方，これとは異なる境界条件をもつ独立な解として，

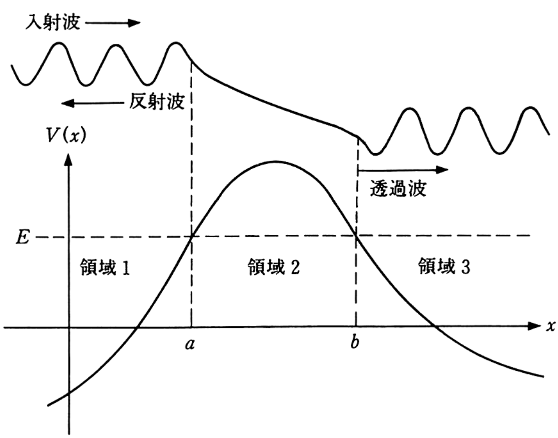


図 10.2　なめらかなポテンシャル障壁へのWKB法の応用

$$x>b \text{ で} \qquad \chi_3(x)=\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_b^x p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \qquad ⓐ$$

$$x<b \text{ で} \qquad \chi_2(x)=\frac{1}{2\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[\frac{1}{\hbar}\int_b^x \rho(x')dx'\right] \qquad ⓑ$$

を，10.3節の例題2(i)で求めた．

φ，χ がみたす式は，1次元の Schrödinger 方程式（10.4）であるから，例題1(ii)によってロンスキアンは x によらない定数となる．したがって，$x>b$ と $x<b$ のそれぞれの領域において，$\varphi\chi'-\chi\varphi'=$定数とおいて，$B$，$C$ の関係を決めてやろう．

$$x>b \text{ では，} \quad \varphi_3\chi_3'-\chi_3\varphi_3'=-\chi_3^2\left(\frac{\varphi_3}{\chi_3}\right)'=-\frac{iC}{\hbar} \qquad ⓒ$$

$$\text{一方，} x<b \text{ では，} \quad \varphi_2\chi_2'-\chi_2\varphi_2'=-\chi_2^2\left(\frac{\varphi_2}{\chi_2}\right)'=\frac{B}{\hbar} \qquad ⓓ$$

$$\therefore B=-iC \qquad ⓔ$$

を得る．

(2) 領域2での解は，ⓔ を②に代入して，

$$\varphi_2(x)=-\frac{iC}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x \rho(x')dx'\right]$$

これを書きなおすと，

$$\varphi_2(x)=-\frac{iC}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^b \rho(x')dx'-\frac{1}{\hbar}\int_a^x \rho(x')dx'\right]$$

$$=-iCe^L\cdot\frac{1}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x \rho(x')dx'\right] \qquad ⓕ$$

となる．ここで，$L\equiv\frac{1}{\hbar}\int_a^b \rho(x')dx'$ とおいた．

10.3節の例題2の接続公式②を用いると，ⓕは領域1で振動解につながり，

$$\varphi_1(x)=-2iCe^L\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right] \qquad ⓖ$$

が得られる．これを書きなおすと，

$$\varphi_1(x)=-iCe^L\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[\exp\left\{i\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a pdx'-\frac{\pi}{4}\right)\right\}\right.$$

$$\left.+\exp\left\{-i\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a pdx'-\frac{\pi}{4}\right)\right\}\right] \qquad ⓗ$$

となり，右辺第1項は入射波を，第2項は障壁で反射された波を表す．

(3) ⓗ で $j_{\rm inc}$ を計算し，①で $j_{\rm trans}$ を計算すると，透過率は，

$$T=\frac{j_{\rm trans}}{j_{\rm inc}}=e^{-2L}=\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \rho(x')dx'\right] \quad ⓘ$$

と得られる．■

第10章　章　末　問　題

[1]　ポテンシャル $V(x)$ が $V(x)=V(-x)$ をみたし，$x>0$ で $V(x)$ が単調に増加していると仮定する．この場合，つぎの問いに答えよ．

(1) 離散的エネルギー E_n を与えるポテンシャル $V(x)$ を WKB 近似で求めよ．

(2) 1次元調和振動子のエネルギースペクトル E_n が，$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ で与えられることを用いて，このときのポテンシャル $V(x)$ を求めよ．

[解]　(1) ポテンシャル $V(x)$ が与えられたとき，

$$\int_a^b p(x)dx=\int_a^b\sqrt{2m[E-V(x)]}dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \quad ⓐ$$

によって，エネルギースペクトルが求まる．

ポテンシャルが偶関数であるから，$a=-b$ で，ⓐは，

$$2\int_0^b\sqrt{2m[E-V(x)]}dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \quad ⓑ$$

となる．n に対する離散的エネルギー E_n が与えられているとき，これを $V(x)$ に対する積分方程式とみなして解いてやろう．n が十分に大きいとき，n を連続変数とみなして，ⓑ の両辺を E に関して微分してやると，

$$\int_0^b\frac{dx}{\sqrt{E-V(x)}}=\frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{dn}{dE}$$

となる．つぎに x のかわりに V を独立変数としてとることにしよう．$V(b)=E$ であることを用いて，

$$\int_{V(0)}^E\frac{dx}{dV}\frac{dV}{\sqrt{E-V(x)}}=\frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{dn}{dE} \quad ⓒ$$

を得る．ⓒ に $(\beta-E)^{-\frac{1}{2}}$ をかけ，E について $V(0)$ から β まで積分すると，

$$\int_{V(0)}^\beta dE\int_{V(0)}^E\frac{dx}{dV}\frac{dV}{\sqrt{(\beta-E)(E-V)}}=\frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\int_{V(0)}^\beta\frac{dn}{dE}\frac{dE}{\sqrt{\beta-E}} \quad ⓓ$$

ここで，

$$ⓓ\text{ の左辺}=\int_{V(0)}^\beta\frac{dx}{dV}dV\int_V^\beta\frac{dE}{\sqrt{(\beta-E)(E-V)}}=\pi x(\beta) \quad ⓔ$$

上の第2式から第3式を導くのに $\sqrt{E-V}=t$ とおいて，

$$\int_V^\beta \frac{dE}{\sqrt{(\beta-E)(E-V)}}=2\int_0^{\sqrt{\beta-V}}\frac{dt}{\sqrt{\beta-V-t^2}}=\pi$$

を用いた．よってⓓの右辺＝ⓔの右辺であることがわかった．

ここで，$\beta=V$ とおくと，

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\int_{V(0)}^V \frac{dn}{dE}\frac{dE}{\sqrt{V-E}}=x(V) \qquad \text{ⓕ}$$

$E=E_n$ を与えると，ⓕより $x(V)$ が得られ，したがって，ポテンシャル $V(x)$ が求まる．

(2) 題意により，$E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$ であるから，$\dfrac{dE}{dn}=\hbar\omega$．ゆえにⓕより，

$$x(V)=\frac{1}{\sqrt{2m\omega^2}}\int_{V(0)}^V \frac{dE}{\sqrt{V-E}}=\frac{1}{\sqrt{2m\omega^2}}2\sqrt{V-V(0)}$$

$$\therefore \quad V=\frac{m\omega^2}{2}x^2+V(0).$$

WKB近似の範囲では，ポテンシャルの最小値 $V(0)$ は基底状態のエネルギーに等しいとしてよいから，$V(0)=E_0\simeq 0$ としてよい．

$\therefore \quad V=\dfrac{m\omega^2}{2}x^2$ が得られる．

［2］　前問で行ったような分析を，球対称なポテンシャルをもつ3次元系に対して行ってみよう．

(1) s-波のエネルギー準位 E_n ($n=1, 2, \cdots$) を与えるようなポテンシャル $V(r)$ はWKB近似の範囲内では，

$$r(V)=\frac{2\hbar}{\sqrt{2m}}\int_{V(0)}^V \frac{dn}{dE}\frac{dE}{\sqrt{V-E}} \qquad \text{①}$$

で与えられることを示せ．

(2) 水素原子の s-波のエネルギー準位が，

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (n=1, 2, \cdots) \qquad \text{②}$$

で与えられることから，ポテンシャル $V(r)$ を定めよ．ただし，$V(0)=-\infty$ としてよい．

［解］　(1) ポテンシャル $V(r)$ が与えられたとき，s-波のエネルギー準位は，

$$\int_0^b \sqrt{2m(E-V(r))}\,dr=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \qquad \text{ⓐ}$$

で与えられる．ⓐの両辺を E に関して微分すると，

$$\int_0^b \frac{dr}{\sqrt{E-V(r)}}=\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{dn}{dE} \qquad ⓑ$$

となる．r のかわりに V を独立変数としてとり，以下は前問と同様にすると，求める式が得られる．

(2) 題意により，$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$ であるから，

$$\frac{dn}{dE}=\frac{1}{2}\left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}(-E)^{-\frac{3}{2}} \qquad ⓒ$$

となる．これを(1)の結果，①に代入すると，

$$r(V)=\frac{2\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{1}{2}\left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{V}(-E)^{-\frac{3}{2}}\frac{dE}{\sqrt{V-E}} \qquad ⓓ$$

を得る．積分変数を $E=Vy$ と書きかえ，V が負であることに注意するとⓓは，

$$r(V)=\frac{e^2}{2}\frac{1}{-V}\int_1^{\infty}\frac{y^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{y-1}}dy \qquad ⓔ$$

となる．右辺の積分は，変数変換 $y=\frac{1}{1-t}$ により容易に計算できて，

$$\int_1^{\infty}\frac{y^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{y-1}}dy=\int_0^1 t^{-\frac{1}{2}}dt=2$$

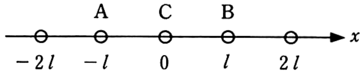
であるから，ⓔは $r(V)=-\frac{e^2}{V}$ となり，

$$V=-\frac{e^2}{r} \qquad ⓕ$$

が得られる．

[3] 2つの重陽子の間にはクローン斥力が働くが，これに抗して2つの重陽子を十分に近づけると，核融合が起こりうる．重水素を十分高い密度にした場合に，常温でも核融合が起こりうるかを調べるためのモデルとして，図のように1次元的に重陽子が等間隔 l で並んだ結晶を考えよう．問題をさらに簡単化して，2つの重陽子AとBは固定して中間の重陽子Cの運動を考える．

(1) 重陽子Cが両側の重陽子AとBから受けるクーロン力のポテンシャルを図示



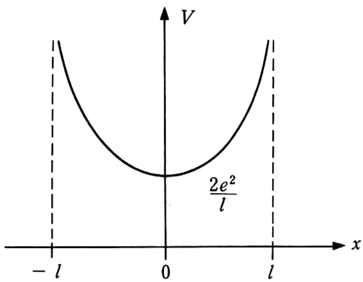
し，平衡点のまわりでの角振動数を求めよ．

(2) 2 つの重陽子が距離 a まで近づいたとき核融合が起きるとする．単位時間あたりに 1 個の重陽子が他の重陽子と核融合する確率を求めよ．

［解］　(1) $V(x)=\dfrac{e^2}{l-x}+\dfrac{e^2}{l+x}$　ⓐ

$$\simeq\frac{2e^2}{l}+\frac{2e^2}{l^3}x^2+\cdots$$

平衡点のまわりでのばね定数は，$k=\dfrac{4e^2}{l^3}$ であるから，重陽子の質量を m とすると，角振動数は $\omega=\sqrt{\dfrac{k}{m}}=\sqrt{\dfrac{4e^2}{ml^3}}$ で与えられる．



(2) $E=\dfrac{2e^2}{l}$ として，WKB 近似で $x=0$ から $x=l-a$ へトンネルする確率を求めよう．そのためには，

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^{l-a}dx\sqrt{2m(V(x)-E)} \qquad ⓑ$$

を計算すればよい．ここで，a は原子核の大きさの程度であるのに対して，l は原子の大きさの程度としているから，ⓑの積分の上端は l でおきかえてよい．ところで，ⓐより，

$$V(x)-E=\frac{e^2}{l-x}+\frac{e^2}{l+x}-\frac{2e^2}{l}=\frac{2e^2}{l}\frac{x^2}{l^2-x^2}$$

であるから，

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^{l}dx\sqrt{2m(V(x)-E)}=\frac{2|e|}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{l}}\int_0^{l}dx\frac{x}{\sqrt{l^2-x^2}}$$

$$=\frac{2|e|\sqrt{lm}}{\hbar}$$

となる．よって，単位時間に重陽子 C が A または B と核融合する確率は，

$$2\frac{\omega}{2\pi}\exp\left[-\frac{4|e|\sqrt{lm}}{\hbar}\right]=\frac{2|e|}{\pi\sqrt{ml^3}}\exp\left[-\frac{4|e|\sqrt{lm}}{\hbar}\right]$$

で与えられる．l を Å 単位で表してこれを評価すると，

$$\frac{1.68}{\sqrt{l^3}}\times 10^{-144\sqrt{l}+14}\mathrm{sec}^{-1}$$

となる．

この結果を信用すると，l が 0.08 Å より少し小さくなると，1 秒間にアボガドロ数個の重陽子のうち 1 個くらいは核融合を起こしうることになる．

第11章　同　種　粒　子

同じ種類の粒子がいくつか含まれるような系を考える．2つの粒子が同種であるということは，古典力学的には，それらの粒子のもつ属性(質量や電荷など)がたまたま等しいということ以上には意味をもたないと思われる．ところが，量子力学では系の状態は状態ベクトルによって完全に指定されているから，2つの同種粒子を入れかえても状態はもとの状態とまったく同じであるはずである．11.1節では，このような制約が現実の系でどのような形で現れているかを説明する．2つの粒子の入れかえに対して波動関数が対称であるような粒子はボソンとよばれ，反対称であるような粒子はフェルミオンとよばれる．11.2節では簡単な例によって，そのような対称性の結果，多粒子系がどのようにふるまうか調べる．11.3節では，場の演算子を導入することによって，同種粒子系がきわめて自然な形で表現できることを示す．このような表現法は第二量子化とよばれており，テクニカルに重要であるのみならず，相対論的量子力学の基礎となるものである．

11.1 フェルミオンとボソン

いろいろな種類の粒子がそれぞれ何個かずつあるような系を考えよう．たとえば，電子3個，α 粒子5個，中性子6個からなる系などを考えるわけである．各粒子の位置 $\boldsymbol{r}$ およびスピンの z 成分 s_z をまとめて ξ と書くことにすると，そのような系の波動関数は，

$$\psi(\xi_1^{(1)},\ \xi_2^{(1)},\ \cdots,\ \xi_{N_1}^{(1)}\ ;\ \xi_1^{(2)},\ \xi_2^{(2)},\ \cdots,\ \xi_{N_2}^{(2)}\ ;\ \xi_1^{(3)},\ \xi_2^{(3)}\cdots,\ \xi_{N_3}^{(3)}\ ;\ \cdots) \qquad (11.1)$$

と表される．ここで，第1の種類の粒子は N_1 個あるとし，その座標を $\xi_1^{(1)}$，…，$\xi_{N_1}^{(1)}$ と書き，第2の種類の粒子は N_2 個あるとし，その座標を $\xi_1^{(2)}$，…，$\xi_{N_2}^{(2)}$ などと書いている．

つぎに，同じ種類の粒子を入れかえる演算子 $\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ を導入しよう．ここで，$\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ は第 a の種類の粒子のうち，i 番目と j 番目のものを入れかえる演算子とする．たとえば，(11.1)のように表された状態に $\hat{P}_{1,2}^{(2)}$ を作用させると，

$$\begin{aligned}(\hat{P}_{1,2}^{(2)}\psi)(\xi_1^{(1)},\ \xi_2^{(1)},\ \cdots,\ \xi_{N_1}^{(1)}\ ;\ \xi_1^{(2)},\ \xi_2^{(2)},\ \cdots,\ \xi_{N_2}^{(2)}\ ;\ \cdots\cdots)\\ =\psi(\xi_1^{(1)},\ \xi_2^{(1)},\ \cdots,\ \xi_{N_1}^{(1)}\ ;\ \xi_2^{(2)},\ \xi_1^{(2)},\ \cdots,\ \xi_{N_2}^{(2)}\ ;\ \cdots\cdots)\end{aligned} \qquad (11.2)$$

のように変化する．$\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ は同種の粒子を入れかえる作用であるから，直観的には，状態ベクトル ψ と $\hat{P}_{i,j}^{(a)}\psi$ は同じ状態を表していると思われる．たとえば2つの α 粒子があったとき，1番目のものがある場所1にあり2番目のものが別の場所2にあるような状態と，1番目のものが場所2にあり2番目のものが場所1にあるような状態を比べてみよう．2つの α 粒子の間に区別がないとすると，このような2つの状態は本質的には同じ状態とみなすのが自然であろう．

このように，同種の粒子を入れかえても状態は変化しないはずであるという直観をとり入れるために，波動関数に対してつぎのような条件を課すことにしよう．

$$\hat{P}_{i,j}^{(a)}\psi=(\text{定数})\times\psi \qquad (i\neq j) \qquad (11.3)$$

ここで，$\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ は2つの粒子を入れかえる演算子であるから，(11.2)からもわかるように，その2乗は1であることに注意しよう．すなわち，$\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ は，

$$(\hat{P}_{i,j}^{(a)})^2=1 \qquad (11.4)$$

をみたしており，その固有値は ±1 であるから，(11.3)の右辺の定数は，$+1$ か -1 のいずれかでなければならない．±1 のうちのどちらをとるかは，粒子の種類ごとに決まっていると仮定すると，(11.3)のような条件は，

$$\hat{P}_{i,j}^{(a)}\psi=c^{(a)}\psi \qquad (i\neq j\ ;\ i,j=1,2,\cdots,N_a) \qquad (11.5)$$

と書ける．ここで $c^{(a)}$ は $+1$ か-1 であり，a で指定される種類の粒子を2つ入れかえたときに，波動関数にかかる因子を表している．

波動関数に対するこのような形の条件が，系の時間発展と矛盾しないことに注意しよう．すなわち，ある時刻において，波動関数が(11.5)の条件をみたしていれば，Schrödinger 方程式に従う時間発展をしても常に同じ条件(11.5)をみたしている．これを示すためには，ハミルトニアン $\hat{H}$ が同種の2つの粒子を入れかえても形をかえないことが，

$$\hat{P}_{i,j}^{(a)}\hat{H}\hat{P}_{i,j}^{(a)}=\hat{H} \tag{11.6}$$

と書けることに気づけばよい．(11.6)は $\hat{P}_{i,j}^{(a)}$ が保存量であることを示しているから，その固有値 $c^{(a)}$ は時間によらないことがわかる．

以上のように，同じ種類の粒子がいくつかある場合には，波動関数に(11.5)のような形の条件が課されていると考えるのが自然であるが，たしかにそうであることが多くの実験事実から知られている．実際，(11.5)に現れる因子 $c^{(a)}$ は粒子の種類によって決まっており，実験的に決めることができる．$c^{(a)}=1$ であるような粒子はボソンあるいはBose統計に従う粒子であるとよばれ，$c^{(a)}=-1$ であるような粒子は，フェルミオンあるいはFermi統計に従う粒子であるとよばれる．実験結果をまとめると，電子，陽子，中性子などスピンが半整数の粒子はフェルミオンであり，α 粒子，中間子，光子などスピンが整数の粒子はボソンであることがわかっている[1]．

例題 1 3個の電子と2個の α 粒子からなる系を考える．

(1) 相互作用としてCoulomb力を考えたときのハミルトニアンを書け．

(2) 2つの電子を入れかえる演算子，および2つの α 粒子を入れかえる演算子を定義し，(1)のハミルトニアンがその入れかえに関して不変であることを示せ．

(3) 波動関数がみたすべき統計性の条件を書け．

解 (1) 電子の位置，運動量，スピンの演算子を，$\hat{\boldsymbol{r}}_i^{(e)}$，$\hat{\boldsymbol{p}}_i^{(e)}$，$\hat{\boldsymbol{s}}_i^{(e)}$ $(i=1, 2, 3)$ とし，α 粒子の位置，運動量の演算子を，$\hat{\boldsymbol{r}}_i^{(\alpha)}$，$\hat{\boldsymbol{p}}_i^{(\alpha)}$ $(i=1, 2)$ とする(α 粒子のスピンはゼロである)．Coulomb力を考えたときのハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{3}\frac{(\hat{\boldsymbol{p}}_i^{(e)})^2}{2m_e}+\sum_{i=1}^{2}\frac{(\hat{\boldsymbol{p}}_i^{(\alpha)})^2}{2m_\alpha}+\sum_{1\le i<j\le 3}\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i^{(e)}-\hat{\boldsymbol{r}}_j^{(e)}|}$$
$$+\frac{4e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1^{(\alpha)}-\hat{\boldsymbol{r}}_2^{(\alpha)}|}-\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{2}\frac{2e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i^{(e)}-\hat{\boldsymbol{r}}_j^{(\alpha)}|} \tag{a}$$

となる．

(2) 1番目と2番目の電子を入れかえる演算子 $\hat{P}_{1,2}^{(e)}$ は，

1) このようなスピンと統計の関係は，非相対論的な量子力学の枠組のなかで論理的に説明することはできないが，相対論的な場の量子論によれば説明することができる．

$$\hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{r}}_1^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{r}}_2^{(e)},\quad \hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{r}}_2^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{r}}_1^{(e)}$$
$$\hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{p}}_1^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{p}}_2^{(e)},\quad \hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{p}}_2^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{p}}_1^{(e)}$$
$$\hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{s}}_1^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{s}}_2^{(e)},\quad \hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{\boldsymbol{s}}_2^{(e)}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{\boldsymbol{s}}_1^{(e)}$$

および,

$$\hat{O}=\hat{\boldsymbol{r}}_3^{(e)},\ \hat{\boldsymbol{p}}_3^{(e)},\ \hat{\boldsymbol{s}}_3^{(e)}\ ;\ \hat{\boldsymbol{r}}_1^{(\alpha)},\ \hat{\boldsymbol{p}}_1^{(\alpha)},\ \hat{\boldsymbol{r}}_2^{(\alpha)},\ \hat{\boldsymbol{p}}_2^{(\alpha)}\ \text{に対して},$$
$$\hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{O}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{O}$$

によって定義される．ハミルトニアンⓐが $\hat{P}_{1,2}^{(e)}$ で不変なこと，すなわち,

$$\hat{P}_{1,2}^{(e)}\hat{H}\hat{P}_{1,2}^{(e)}=\hat{H}$$

は明らかであろう．他の演算子 $\hat{P}_{i,j}^{(\alpha)}$ も同様である．

(3) 各電子の位置およびスピンの z 成分を $\boldsymbol{r}_i^{(e)}$, $s_i^{(e)}(i=1,\ 2,\ 3)$ と書き，各 α 粒子の位置を $\boldsymbol{r}_i^{(\alpha)}(i=1,\ 2)$ と書くと，波動関数は,

$$\psi(\boldsymbol{r}_1^{(e)},\ s_1^{(e)},\ \boldsymbol{r}_2^{(e)},\ s_2^{(e)},\ \boldsymbol{r}_3^{(e)},\ s_3^{(e)}\ ;\ \boldsymbol{r}_1^{(\alpha)},\ \boldsymbol{r}_2^{(\alpha)})$$

と書ける．電子はフェルミオンであるから，ψ は3つの電子の入れかえに対して完全反対称であり，α 粒子はボソンであるから ψ は2つの α 粒子の入れかえに対しては対称であるべきである．すなわち，σ を $\{1,\ 2,\ 3\}$ の置換とし，τ を $\{1,\ 2\}$ の置換としたとき，ψ は,

$$\psi(\boldsymbol{r}_{\sigma(1)}^{(e)},\ s_{\sigma(1)}^{(e)},\ \boldsymbol{r}_{\sigma(2)}^{(e)},\ s_{\sigma(2)}^{(e)},\ \boldsymbol{r}_{\sigma(3)}^{(e)},\ s_{\sigma(3)}^{(e)}\ ;\ \boldsymbol{r}_{\tau(1)}^{(\alpha)},\ \boldsymbol{r}_{\tau(2)}^{(\alpha)})$$
$$=\mathrm{sgn}(\sigma)\,\psi(\boldsymbol{r}_1^{(e)},\ s_1^{(e)},\ \boldsymbol{r}_2^{(e)},\ s_2^{(e)},\ \boldsymbol{r}_3^{(e)},\ s_3^{(e)}\ ;\ \boldsymbol{r}_1^{(\alpha)},\ \boldsymbol{r}_2^{(\alpha)})$$

をみたす．ここで $\mathrm{sgn}(\sigma)$ は,

$$\mathrm{sgn}(\sigma)=\begin{cases}+1 & \sigma\ \text{が偶置換のとき}\\ -1 & \sigma\ \text{が奇置換のとき}\end{cases}$$

で定義されるものとする． ∎

複合粒子の統計性

原子や原子核のように，いくつかの粒子からなる系の基底状態であるような複合粒子を考えよう．複合粒子を励起するのに必要なエネルギーに比べて，十分に低いエネルギー領域では，複合粒子をあたかも基本粒子のように扱ってもよいだろう．すなわち，いくつかの複合粒子からなる系の波動関数は，それぞれの複合粒子の重心座標およびスピンの z 成分の関数として表せる[1]．

いま考えている複合粒子が，N_{F} 個のフェルミオンと N_{B} 個のボソンからできてい

1) このように考えると，あるエネルギー領域までででは素と思われる粒子も，さらに高いエネルギー領域で複合粒子であることが判明することがあるのがわかるだろう．実際，陽子や中性子は，1 GeV 程度に比べて十分小さいエネルギー領域では素な粒子としてふるまうが，実は3つのクォークからなる複合粒子である．

るとしよう．このとき，2つの複合粒子を入れかえるということは，それぞれの構成要素を入れかえることにほかならないから，波動関数には因子$(-1)^{N_F}$がかかるはずである(図11.1)．すなわち，偶数個のフェルミオンを含むような複合粒子はボソンであり，奇数個のフェルミオンを含むような複合粒子はフェルミオンである．つぎの例題に示すように，この結果は，スピンと統計の一般的な関係と矛盾しないことに注意しよう．

例題2　半整数スピンをもついくつかのフェルミオンと整数スピンをもついくつかのボソンからなる複合粒子は，そのスピンが半整数ならばフェルミオンであり，そのスピンが整数ならばボソンであることを示せ．すなわち，スピンと統計の間の一般的関係は，基本粒子に対してみたされていれば，複合粒子に対しても成り立つ．

解　この例題のすぐ前で議論したように，N_F個のフェルミオンとN_B個のボソンからなる複合粒子は，N_Fが奇数ならフェルミオンであり，N_Fが偶数ならばボソンである．ここで，2つの角運動量J_1とJ_2を合成するとJ_1+J_2，J_1+J_2-1，…，$|J_1-J_2|$となることを思い出そう．そうするとN_F個の半整数スピンとN_B個の整数スピンおよび軌道角運動量(整数)を合成したものは，N_Fが奇数なら半整数であり，N_Fが偶数ならば整数であることがわかる．すなわち，複合粒子が半整数スピンをもてばそれはフェルミオンであり，整数スピンをもてばボソンである．　∎

［問題1］　つぎの粒子はボソンかフェルミオンか．

(i) ^{4}He原子

(ii) ^{3}He原子

(iii) 重陽子(陽子と中性子が結合したもの)

(iv) ポジトロニウム(電子と陽電子が結合したもの)

(v) Λ粒子(uクォークとdクォークとsクォークが結合したもの)

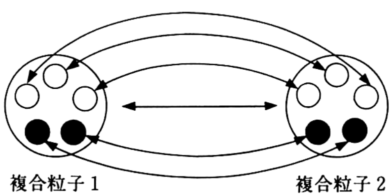


図11.1　複合粒子の統計性

2つの複合粒子を入れかえるということは，それぞれの構成粒子を入れかえることにほかならない．

(vi) π^+ 中間子(u クォークと反 d クォークが結合したもの)

[解] (i) ^{4}He 原子核(α 粒子)は陽子 2 個と中性子 2 個からできておりボソンである．^{4}He 原子は，それに 2 個の電子が結合したものだからボソン．

(ii) ^{3}He 原子核は陽子 2 個と中性子 1 個からできているからフェルミオンであり，^{3}He 原子はそれに 2 個の電子が結合したものだからフェルミオン．

(iii) 重陽子は 2 つのフェルミオンからなるからボソン．

(iv) 電子，陽電子ともにフェルミオンであるから，ポジトロニウムはボソン．

(v) クォークはフェルミオンであるから，それら 3 つからなる Λ 粒子はフェルミオンである．一般に，陽子，中性子，Λ 粒子など 3 つのクォークからできている系はまとめて，バリオンとよばれており，フェルミオンである．

(vi) 一般に，クォークと反クォークの結合した系をメソンとよんでいるが，クォークも反クォークもフェルミオンであるから，メソンはボソンである． ▮

11.2 簡　単　な　例

(a) 同種の 2 粒子からなる系

同じ種類の 2 つの粒子の間に中心力が働いているような系を考えよう．2 つの粒子の位置，運動量，スピンの演算子を $\hat{\boldsymbol{r}}_i$，$\hat{\boldsymbol{p}}_i$，$\hat{\boldsymbol{s}}_i(i=1,\ 2)$ とすると，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{2}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m}+V(|\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2|) \tag{11.7}$$

と書ける．重心座標，相対座標およびそれらの正準共役量を $\hat{\boldsymbol{R}}$，$\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{P}}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$ とすると，

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{R}}&=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{r}}_1+\hat{\boldsymbol{r}}_2)\\ \hat{\boldsymbol{P}}&=\hat{\boldsymbol{p}}_1+\hat{\boldsymbol{p}}_2\\ \hat{\boldsymbol{r}}&=\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2\\ \hat{\boldsymbol{p}}&=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{p}}_1-\hat{\boldsymbol{p}}_2)\end{aligned} \tag{11.8}$$

であるが，これらを使って $\hat{H}$ を書きなおすと，よく知られているように，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2M}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(|\hat{\boldsymbol{r}}|) \tag{11.9}$$

となり，重心運動と相対運動に分離される．ここで，$M=2m$，$\mu=\dfrac{m}{2}$ は，それぞれ全質量および換算質量である．

つぎに，通常の手続きに従って波動関数を重心運動と相対運動に分離して，

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1,\ s_1^z\ ;\ \boldsymbol{r}_2,\ s_2^z)=\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R})\varphi_{\mathrm{rel}}(\boldsymbol{r},\ s_1^z,\ s_2^z) \tag{11.10}$$

の形に書こう．ここで，s_1^z，s_2^z は 2 つの粒子のスピンの z 成分である．そうすると，よく知られているように固有値方程式

$$\hat{H}\varphi=E\varphi \tag{11.11}$$

は，

$$\hat{H}_{\mathrm{CM}}\varphi_{\mathrm{CM}}=E_{\mathrm{CM}}\varphi_{\mathrm{CM}},\quad \hat{H}_{\mathrm{CM}}=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2M} \tag{11.12a}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{rel}}\varphi_{\mathrm{rel}}=E_{\mathrm{rel}}\varphi_{\mathrm{rel}},\quad \hat{H}_{\mathrm{rel}}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(|\hat{\boldsymbol{r}}|) \tag{11.12b}$$

$$E=E_{\mathrm{CM}}+E_{\mathrm{rel}} \tag{11.12c}$$

の形に変数分離される．

ここまでは，水素原子などの一般の 2 粒子系の場合と同じであるが，2 つの粒子が同じ種類であるときは，波動関数に統計性の条件

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1,\ s_1^z\ ;\ \boldsymbol{r}_2,\ s_2^z)=c\ \varphi(\boldsymbol{r}_2,\ s_2^z\ ;\ \boldsymbol{r}_1,\ s_1^z) \tag{11.13}$$

を課さなければならない．ここで，考えている粒子がボソンのときは $c=1$，フェルミオンのときは $c=-1$ である．2 つの粒子の入れかえに対して，重心座標 $\boldsymbol{R}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)$ は不変であるが，相対座標 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ は符号を変えることに注意しよう．この事実に注意して，(11.13) に (11.10) を代入すると，統計性の条件は重心運動に対しては何ら制約を与えないが，相対運動に対しては，

$$\varphi_{\mathrm{rel}}(\boldsymbol{r},\ s_1^z,\ s_2^z)=c\varphi_{\mathrm{rel}}(-\boldsymbol{r},\ s_2^z,\ s_1^z) \tag{11.14}$$

という条件を課していることがわかる．重心運動は自明であるから，以下では相対運動だけを議論することにしよう．すなわち，(11.14) をみたす φ_{rel} に対して，固有値方程式 (11.12b) を考えるわけである．

相対運動のハミルトニアン $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ がスピン演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}_1$，$\hat{\boldsymbol{s}}_2$ を含まないときは，相対運動の波動関数 φ_{rel} を $\boldsymbol{r}$ に依存する部分と，スピン s_1^z, s_2^z に依存する部分に分離して，

$$\varphi_{\mathrm{rel}}(\boldsymbol{r}, s_1^z, s_2^z)=f(\boldsymbol{r})\chi(s_1^z, s_2^z) \tag{11.15}$$

の形に書いておくと便利である．そうすると，固有値方程式 (11.12b) は，

$$\hat{H}_{\mathrm{rel}}\,f=E_{\mathrm{rel}}f,\quad \hat{H}_{\mathrm{rel}}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(|\hat{\boldsymbol{r}}|) \tag{11.16a}$$

となり，統計性の条件 (11.14) は，

$$f(\boldsymbol{r})\,\chi(s_1^z, s_2^z)=c\,f(-\boldsymbol{r})\,\chi(s_2^z, s_1^z) \tag{11.16b}$$

と表される．

(11.16a) は中心力の 1 体問題と同じであるから，角運動量を対角化することに

よって解くことができる．すなわち，$f(\boldsymbol{r})$ は，球関数と動径波動関数の積の形

$$f(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \tag{11.17}$$

に書ける．ここで，球関数 $Y_{l,m}$ のパリティが $(-1)^l$ であること，すなわち，$\boldsymbol{r}\mapsto-\boldsymbol{r}$ の変換に対して $Y_{l,m}$ には因子 $(-1)^l$ がかかることを思い出すと，(11.17)のように軌道角運動量の大きさが l であるような状態に対しては，

$$f(-\boldsymbol{r})=(-1)^l f(\boldsymbol{r}) \tag{11.18}$$

であることがわかる．これを(11.16b)に代入すると，

$$\chi(s_1^z, s_2^z)=(-1)^l\, c\, \chi(s_2^z, s_1^z) \tag{11.19}$$

が得られるが，これは，重心のまわりの軌道角運動量 l とスピン部分の波動関数の対称性に関係がついていることを示している．いくつかの具体例をつぎの例題で調べておこう．

例題 1 同じ種類の 2 つの粒子からなる系の合成スピンと軌道角運動量の関係を，それぞれの粒子が，(i) スピン 0, (ii) スピン $\frac{1}{2}$, (iii) スピン 1 の場合について調べよ．

解 (i) スピン 0 の粒子はボソンであるから，(11.19)で $c=1$ であり，スピンの自由度はないから，$\chi=1$ である．よって(11.19)から $(-1)^l=1$，すなわち，重心のまわりの軌道角運動量の大きさは偶数でなければならないことがわかる．

(ii) スピン $\frac{1}{2}$ の粒子はフェルミオンであるから，$c=-1$ である．一方，スピンの波動関数は，つぎのように合成スピンが 1 の場合と 0 の場合に分けられる．

$$\left.\begin{aligned}
\chi_{1,1}(s_1^z, s_2^z)&=\alpha(s_1^z)\alpha(s_2^z)\\
\chi_{1,0}(s_1^z, s_2^z)&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(s_1^z)\beta(s_2^z)+\beta(s_1^z)\alpha(s_2^z)]\\
\chi_{1,-1}(s_1^z, s_2^z)&=\beta(s_1^z)\beta(s_2^z)
\end{aligned}\right\} \quad \text{ⓐ}$$

$$\chi_{0,0}(s_1^z, s_2^z)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(s_1^z)\beta(s_2^z)-\beta(s_1^z)\alpha(s_2^z)] \quad \text{ⓑ}$$

ここで，χ_{S,S^z} は合成スピンの大きさが S であり，その z 成分が S^z であるようなスピン波動関数である．また，α, β は上向きスピンおよび下向きスピンを示す 1 体の波動関数であり，

$$\alpha(s^z)=\begin{cases}1 & s^z=\dfrac{1}{2}\text{ のとき}\\[2ex] 0 & s^z=-\dfrac{1}{2}\text{ のとき}\end{cases}$$

$$\beta(s^z)=\begin{cases}0 & s^z=\dfrac{1}{2}\text{ のとき}\\[2ex] 1 & s^z=-\dfrac{1}{2}\text{ のとき}\end{cases}$$

で与えられる．ⓐ，ⓑからわかるように，合成スピンが1のものは2つの変数 s_1^z，s_2^z の入れかえに対して対称であるが，合成スピンが0のものは反対称である．すなわち，

$$\chi_{S,S^z}(s_1^z,\,s_2^z)=(-1)^{S+1}\chi_{S,S^z}(s_2^z,\,s_1^z) \qquad ⓒ$$

と書ける．$c=-1$ に注意すると，(11.19)は，$(-1)^{l+S}=1$ となるから，重心のまわりの軌道角運動の大きさ l は，合成スピンが1であるか0であるかに応じて，奇数あるいは偶数であることがわかる．

(iii) スピン1の粒子はボソンである．2つのスピン1を合成すると，合成スピンの大きさは2，1，0となる．この場合にもⓐ，ⓑと同様に調べてみると，そのスピン波動関数 χ は2つのスピン変数の入れかえに対して，それぞれ，偶，奇，偶であることがわかる．これに座標の入れかえ $\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$ からくる因子 $(-1)^l$ をかけたものが1でなければならないから，軌道角運動量の大きさ l は，合成スピンが2，1，0のいずれであるかに応じて，偶数，奇数，偶数でなければならないことがわかる． ∎

(b) 相互作用のない同種粒子からなる系

たがいには相互作用をしないような N 個の同種粒子が，共通のポテンシャルのなかにおかれているような系を考えよう．たとえば，多電子原子で各電子に働く力として原子核からのCoulomb力は考えるが，電子間の相互の力は無視してしまったような系を考える．この場合，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m}+V(\hat{\boldsymbol{r}}_i)\right) \qquad (11.20)$$

のように，それぞれの粒子に作用するような1体の演算子の和として書ける．次節でもみるように，このような系を調べることは同種粒子系を系統的に記述するための基礎となるものであるから，少し一般的な立場から問題を整頓しておこう．

まず，ある種類の粒子が1つだけあるときを考え，その状態空間を V とし，その正規直交基底を $\{|\varphi_n\rangle\,;\,n=1,\,2,\,\cdots\}$ とする．つぎに，この粒子が N 個あるような系を考えると，粒子が同じ種類であることを考慮しなければ，その状態空間は，

$$|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle \qquad (n_1,\,n_2,\,\cdots,\ n_N=1,2,3,\cdots) \qquad (11.21)$$

ではられる．そのような空間を V^N と書こう[1]．ところが，いま考えている N 個の粒子が同じ種類のものであることを考慮に入れると，系の状態空間は V^N の元のうちで統計性の条件

$$\hat{P}_{i,j}|v\rangle=c|v\rangle \qquad (1\leqq i<j\leqq N) \tag{11.22}$$

をみたすもの全体のなす部分空間であるとしなければならない．ここで，演算子 $\hat{P}_{i,j}$ は i 番目と j 番目の粒子の状態を入れかえる演算子

$$\begin{aligned}&\hat{P}_{i,j}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{i\,\text{番目}}{|\varphi_{n_i}\rangle}\cdots\underset{j\,\text{番目}}{|\varphi_{n_j}\rangle}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&=|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_j}\rangle\cdots|\varphi_{n_i}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\end{aligned} \tag{11.23}$$

であり，c は考えている粒子がボソンであるかフェルミオンであるかに応じて，+1 か−1 である．考えている粒子がボソンであるときの N 粒子の状態空間を $V^N{}_\mathrm{B}$ と書き，フェルミオンであるときを $V^N{}_\mathrm{F}$ と書くことにすると，

$$V^N{}_\mathrm{B}=\{|v\rangle\in V^N\,;\,\hat{P}_{i,j}|v\rangle=|v\rangle \qquad (1\leqq i<j\leqq N)\} \tag{11.24a}$$

$$V^N{}_\mathrm{F}=\{|v\rangle\in V^N\,;\,\hat{P}_{i,j}|v\rangle=-|v\rangle \qquad (1\leqq i<j\leqq N)\} \tag{11.24b}$$

である．すなわち，$V^N{}_\mathrm{B}$ は V^N の元のうち粒子の入れかえに対して完全対称なもの全体であり，$V^N{}_\mathrm{F}$ は V^N の元のうち粒子の入れかえに対して完全反対称なもの全体である[2]．

N 粒子系の状態空間 $V^N{}_\mathrm{B}$，あるいは $V^N{}_\mathrm{F}$ の基底を構成するために，つぎのようにして対称化の演算子 $\hat{\mathscr{S}}$ および反対称化の演算子 $\hat{\mathscr{A}}$ を導入しよう．

$$\begin{aligned}&\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in S_N}|\varphi_{n_{\sigma(1)}}\rangle|\varphi_{n_{\sigma(2)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\sigma(N)}}\rangle\end{aligned} \tag{11.25a}$$

$$\begin{aligned}&\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{N_N}\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in S_N}\mathrm{sgn}\sigma|\varphi_{n_{\sigma(1)}}\rangle|\varphi_{n_{\sigma(2)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\sigma(N)}}\rangle\end{aligned} \tag{11.25b}$$

ここで，S_N は $\{1, 2, \cdots, N\}$ の置換全体の集合であり，$\mathrm{sgn}\sigma$ は，σ が偶置換であるか奇置換であるかに応じて，+1 または−1 の値をとるものとする．つぎの例題に示すように，$\hat{\mathscr{S}}$ および $\hat{\mathscr{A}}$ を使うと，$V^N{}_\mathrm{B}$ および $V^N{}_\mathrm{F}$ の基底として，

$$\{\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\,;\,n_1\leqq n_2\leqq\cdots\leqq n_N\} \tag{11.26a}$$

$$\{\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\,;\,n_1<n_2<\cdots<n_N\} \tag{11.26b}$$

の形のものがとれることがわかる．

---

1) 数学では，(11.21) は，$|\varphi_{n_1}\rangle\otimes|\varphi_{n_2}\rangle\otimes\cdots\otimes|\varphi_{n_N}\rangle$ と書かれるものであり，V^N は N 個の V のテンソル積 $V\otimes V\otimes\cdots\otimes V$ のことである．

2) ここでは，冗長な繰り返しをさけるために，ボソンに対する議論とフェルミオンに対する議論を同時に行っているが，もちろん実際は，粒子はボソンであるかフェルミオンであるかのどちらかであって，物理的には $V^N{}_\mathrm{B}$ と $V^N{}_\mathrm{F}$ が同じ V に対して同時に現れることはない．

例題 2 (11.26a), (11.26b)がそれぞれ $V^N{}_{\mathrm{B}}$ および $V^N{}_{\mathrm{F}}$ の基底になっていることを示せ.

解 (i) $\hat{\mathscr{S}}V^N = V^N{}_{\mathrm{B}}$ であること

$\hat{\mathscr{S}}$は, 状態ベクトルを粒子の入れかえに対して対称化する演算子であるから, V^N の任意の元に$\hat{\mathscr{S}}$を作用させたものは $V^N{}_{\mathrm{B}}$ の元である. すなわち, $\hat{\mathscr{S}}V^N \subset V^N{}_{\mathrm{B}}$ である. 一方, $V^N{}_{\mathrm{B}}$ の元は粒子の入れかえに対して完全対称であるから, $\hat{\mathscr{S}}$を作用させても変化しない. これは, $\hat{\mathscr{S}}V^N{}_{\mathrm{B}} = V^N{}_{\mathrm{B}}$ ということであり, これと自明な包含関係 $\hat{\mathscr{S}}V^N \supset \hat{\mathscr{S}}V^N{}_{\mathrm{B}}$ から$\hat{\mathscr{S}}V^N \supset V^N{}_{\mathrm{B}}$ がわかる. よって$\hat{\mathscr{S}}V^N = V^N{}_B$ が示された.

(ii) (11.26a)が $V^N{}_{\mathrm{B}}$ の基底であること

(i) の結果は, $V^N{}_{\mathrm{B}}$ が, $\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$ $(n_1, n_2, \cdots n_N = 1, 2, 3, \cdots)$ ではられることを意味している. ところが$\hat{\mathscr{S}}$の定義より, 任意の$\tau \in S_N$ に対して,

$$\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_{\tau(1)}}\rangle|\varphi_{n_{\tau(2)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\tau(N)}}\rangle = \hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$$

であるから, $n_1, n_2, \cdots, n_N$ に適当な置換を施して, はじめから, $n_1 \leqq n_2 \leqq \cdots \leqq n_N$ のものだけ考えておけば十分である. (11.26a)のベクトルが一次独立であることは明らかであろう.

(iii) $\hat{\mathscr{A}}V^N = V^N{}_{\mathrm{F}}$ であること

(i)とまったく同様に示せる.

(iv) (11.26b)が $V^N{}_{\mathrm{F}}$ の基底であること

(iii)は, $V^N{}_{\mathrm{F}}$ が$\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$ $(n_1, n_2, \cdots, n_N = 1,\ 2,\ 3\cdots)$ ではられることを意味している. ここで, $\hat{\mathscr{A}}$は反対称化の演算子であるから, $n_1, n_2, \cdots, n_N$ のうちに等しいものがあれば, $\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$ はゼロである. よってはじめから $n_1, n_2, \cdots, n_N$ はすべて相異なるとしてよい. ところが, $\hat{\mathscr{A}}$の定義から,

$$\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_{\tau(1)}}\rangle|\varphi_{n_{\tau(2)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\tau(N)}}\rangle = \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$$

が成り立つから, はじめから $n_1 < n_2 < \cdots < n_N$ のものだけ考えておけば十分である. (11.26b)のベクトルが一次独立であることは明らかであろう. ∎

(11.26a)および(11.26b)は直観的に理解しやすい形をしていることに注意しよう. まず, 1体の状態空間の基底ベクトル $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, … のそれぞれは, 粒子を受け入れる座席のようなものであると想像することにし, それを1粒子準位あるいは単に準位とよぼう. このように想像したうえで, n 番目の準位が1つの粒子によって占められている状態が $|\varphi_n\rangle$ であると考えるのである. そうすると, 粒子が2個あるときに状態を指定するためには, どの準位とどの準位に粒子がいるかを指定してやればよいと思われる.

ここで, 2つの粒子には区別がなく, どちらの粒子がどちらの準位を占めるかを論

じることには意味がないとしよう．この考えをすすめると，粒子が多数ある場合も同様に，どの準位が粒子によって占められているかを指定することによって，量子的な状態が1つ指定されるであろう．実際，(11.26a)に示された状態$\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$は，$N$個の粒子によって準位$n_1, n_2, \cdots, n_N$が占められている状態とみなせる．ここで，$n_1, n_2, \cdots, n_N$は，$n_1 \leqq n_2 \leqq \cdots \leqq n_N$をみたせばよいのだから，そのなかには等しいものがいくつかあってもよいことに注意しよう．

このことは，粒子がボソンならば1つの準位にいくつでも粒子が入りうることを意味している．一方，(11.26b)に示された状態$\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$も$N$個の粒子によって準位$n_1$，$n_2$，$\cdots$，$n_N$が占められている状態とみなせるが，この場合は$n_1<n_2<\cdots<n_N$であるから，$n_1, n_2, \cdots, n_N$のなかに等しいものがあってはならないことに注意しよう．このことは，粒子がフェルミオンならば1つの準位には2つ以上の粒子が入れないことを意味している．フェルミオンがみたすこのような性質は**Pauliの排他原理**とよばれている．

以上の準備のもとに，はじめに設定した問題に戻ろう．すなわち，N粒子系のハミルトニアン$\hat{H}$が，1体のハミルトニアン$\hat{H}^{(1)}$の和として書けている場合を考える．

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_i^{(1)} \tag{11.27}$$

ここで，$\hat{H}_i^{(1)}$は，演算子$\hat{H}^{(1)}$がi番目の粒子の状態空間に働くことを示している[1]．$\hat{H}^{(1)}$を対角化する基底を$\{|\varphi_n\rangle\,;\,n=0,1,2,\cdots\}$とし，対応する固有値を$\varepsilon_n$と書こう．

$$\hat{H}^{(1)}|\varphi_n\rangle=\varepsilon_n|\varphi_n\rangle \tag{11.28}$$

そうすると，明らかに，V^Nの元$|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$は$\hat{H}$の固有ベクトルであり，固有値は各因子のもつ$\hat{H}^{(1)}$の固有値の和である．

$$\begin{aligned}&\hat{H}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&=(\varepsilon_{n_1}+\varepsilon_{n_2}+\cdots+\varepsilon_{n_N})|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\end{aligned} \tag{11.29}$$

ハミルトニアン$\hat{H}$は，対称化および反対称化の演算子$\hat{\mathscr{S}}$，$\hat{\mathscr{A}}$と可換であることに注意すると，(11.29)よりけっきょく，

$$\hat{H}(\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=(\varepsilon_{n_1}+\cdots+\varepsilon_{n_N})(\hat{\mathscr{S}}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \tag{11.30a}$$

---

1) 数学的な記法を使うと，

$$\hat{H}_i^{(1)}=1\otimes1\otimes\cdots\otimes\underset{i\,\text{番目}}{\hat{H}^{(1)}}\otimes1\otimes\cdots\otimes1$$

ということである．

$$\hat{H}(\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=(\varepsilon_{n_1}+\cdots+\varepsilon_{n_N})(\hat{\mathscr{A}}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \tag{11.30b}$$

が得られる．これは，N 個の粒子が準位 n_1，…，n_N を占めているとき，その全エネルギーは，個々の準位のもつエネルギーの和であることを示している．このような系の具体例としてつぎの例題を考えよう．

例題 3　3 次元の球対称な調和ポテンシャルのなかに，スピン $\frac{1}{2}$ をもつ N 個のおたがいに相互作用しない同種粒子（フェルミオン）がある．基底状態に縮退がないのは N がどのような値のときか．

解　このような系のハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_i^{(1)},\quad \hat{H}^{(1)}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{\boldsymbol{r}}^2$$

と書ける．$\hat{H}^{(1)}$ は空間の 3 つの方向を分離することにより対角化できて，固有値は，$\hbar\omega\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)$ $(n_x, n_y, n_z=0,1,2,\cdots)$ で与えられる．これを，$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)$ $(n=0,1,2,\cdots)$ と書くと，$n=n_x+n_y+n_z$ であるから，スピンを考えなければ E_n は，${}_3\mathrm{H}_n=\frac{(n+2)(n+1)}{2}$ 重に縮退している(図 11.2)．$N=1$ のときは，基底状態は，最低の準位 $(n=0)$ に粒子を 1 つつめた状態であるが，スピンは $\frac{1}{2}$ としているからスピンの向きについて 2 重に縮退している．$N=2$ のときは，最低の準位 $(n=0)$ でスピン上向きとスピン下向きの両方がつまったものが基底状態であり，縮退はない．$N=3$ のときは，基底状態を作るためには 3 つ目の粒子を 2 番目の準位 $(n=1)$ に入れればよいが，スピンも考慮すると $3\times2=6$ 重に縮退している．このように

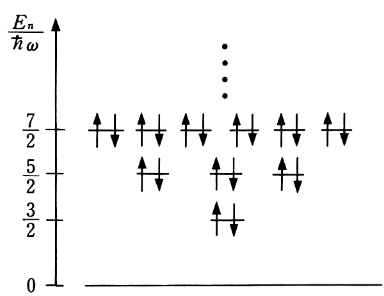


図 11.2　3 次元調和振動子のエネルギー準位

考えると，つぎに縮退がなくなるのは，$n=1$ の $3\times 2=6$ 個（$\times 2$ はスピンの自由度）の準位すべてに粒子をつめたときであるから，$n=0$ の 2 個の準位とたして，$N=6+2=8$ のときである．以下，同様にして，n 番目の準位までいっぱいにつめたときに縮退がなくなるが，そのためには，

$$N=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(k+2)(k+1)}{2}\times 2=\frac{1}{3}n(n+1)(n+2) \qquad (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$$

個の粒子が必要である（第13章 8 節例題参照）．▮

［問題 2］ $\varphi_1(\xi)$, …, $\varphi_N(\xi)$ をフェルミオンの 1 体波動関数とする．ここで，ξ は，粒子の位置とスピンの z 成分をまとめて書いたものである．N 粒子系の波動関数 $\varphi(\xi_1,\ \xi_2,\ \cdots,\ \xi_N)$ として $\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2)\cdots\varphi_N(\xi_N)$ を反対称化したものを考えると，

$$\varphi(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\varphi_1(\xi_1) & \varphi_1(\xi_2) & \cdots & \varphi_1(\xi_N)\\ \varphi_2(\xi_1) & \varphi_2(\xi_2) & \cdots & \varphi_2(\xi_N)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \varphi_N(\xi_1) & \varphi_N(\xi_2) & \cdots & \varphi_N(\xi_N)\end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det(\varphi_i(\xi_j))$$

と書けることを示せ．ここで全体の因子 $\dfrac{1}{\sqrt{N!}}$ は $\varphi_i(\xi)$ $(i=1,\ 2,\ \cdots,\ N)$ が 1 体の波動関数として正規直交であるとき，$\varphi(\xi_1,\cdots,\xi_N)$ が N 体の波動関数として 1 に規格化されているようにとった．上のような形の行列式を Slater 行列式とよんでいる．

［解］ $\varphi_1(\xi_1)\,\varphi_2(\xi_2)\cdots\varphi_N(\xi_N)$ を $\xi_1,\cdots,\xi_N$ に関して反対称化したものは定義により，

$$\varphi(\xi_1,\cdots,\xi_N)=K\sum_{\sigma\in S_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\ \varphi_1(\xi_{\sigma(1)})\cdots\varphi_N(\xi_{\sigma(N)})$$

であるが，右辺の和は，$\varphi_i(\xi_j)$ を i，j 成分とする行列式にほかならない．定数 K を決めるために規格化積分を計算しよう．

$$\int d\xi_1\cdots d\xi_N\ \varphi^*(\xi_1,\cdots,\xi_N)\ \varphi(\xi_1,\cdots,\xi_N)$$
$$=|K|^2\sum_{\sigma\in S_N}\sum_{\tau\in S_N}\int d\xi_1\cdots d\xi_N\ \varphi_1{}^*(\xi_{\sigma(1)})\cdots\varphi_N^*(\xi_{\sigma(N)})\cdot$$
$$\cdot\ \varphi_1(\xi_{\tau(1)})\cdots\varphi_N(\xi_{\tau(N)})$$

$\varphi_i(\xi)$ $(i=1,\ 2,\ \cdots,\ N)$ が正規直交であることに注意すると，右辺は $\sigma\neq\tau$ のと

きはゼロとなることがわかり，

$$=|K|^2\sum_{\sigma\in S_N}\int d\xi_1\cdots d\xi_N\,|\varphi_1(\xi_{\sigma(1)})|^2\cdots|\varphi_N(\xi_{\sigma(N)})|^2$$
$$=|K|^2N!$$

と計算できる．よって $K=\dfrac{1}{\sqrt{N!}}$ が得られた．　▮

11.3　第二量子化

(a)　ボソンの第二量子化

ある種類のボソンが1つだけあるときの状態空間を V とし，その正規直交基底を $\{|\varphi_n\rangle\,;\,n=1,\,2,\,\cdots\}$ としよう．前節でみたように，このボソンが N 個あるときの状態空間 $V^N{}_{\mathrm{B}}$ は，

$$\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\qquad(n_1\leqq n_2\leqq\cdots\leqq n_N)\tag{11.31}$$

の形の状態ベクトルではられる．ここで，$\hat{\mathscr{S}}$ は対称化の演算子であり，

$$\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in S_N}|\varphi_{n_{\sigma(1)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\sigma(N)}}\rangle\tag{11.32}$$

で定義される．以下でみるように状態空間 $V^N{}_{\mathrm{B}}$ のこのような構造は，実は多自由度の調和振動子の状態空間と同じものであることがわかる．

まず，1粒子の状態空間 V の基底 $\{|\varphi_n\rangle\,;\,n=1,2,\cdots\}$ と同じラベル(いまの場合，$|\varphi_n\rangle$ の n)をもつような生成・消滅演算子 $\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ を形式的に導入しよう．すなわち，$\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ $(n=1,2,\cdots)$ は，ある抽象的な空間 V_0 に働く演算子であり，交換関係

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_m,\hat{a}_n^\dagger]=\delta_{m,n}\\&[\hat{a}_m,\hat{a}_n]=0,\qquad[\hat{a}_m^\dagger,\hat{a}_n^\dagger]=0\end{aligned}\tag{11.33}$$

をみたしているものとする．さらに，V_0 には調和振動子の基底状態と同様に，すべての消滅演算子で消されるような状態 $|0\rangle$ が一意的に存在するとする．

$$\hat{a}_n|0\rangle=0\qquad(\text{すべての}\ n\ \text{に対して})\tag{11.34}$$

つぎに，数演算子 $\hat{\mathscr{N}}$ を，

$$\hat{\mathscr{N}}=\sum_{n=1}^{\infty}\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n\tag{11.35}$$

によって導入すると，明らかに，

$$\hat{\mathscr{N}}|0\rangle=0\tag{11.36}$$

および，

$$[\hat{\mathscr{N}},\hat{a}_n^\dagger]=\hat{a}_n^\dagger\qquad(\text{任意の}\ n\ \text{に対して})\tag{11.37}$$

をみたしている．(11.36)と(11.37)からわかるように，$\hat{\mathscr{N}}$ は $|0\rangle$ にかかっている生成

演算子の数を数える演算子である．すなわち，

$$\hat{\mathscr{N}}\,\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_k}|0\rangle = k\,\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_k}|0\rangle \tag{11.38}$$

が成り立つ．

調和振動子の場合と同様に考えると，空間 V_0 は，$|0\rangle$ にいくつかの生成演算子を作用させたもの

$$\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_k}|0\rangle \tag{11.39}$$

ではられることがわかる．ここで，生成演算子どうしは可換であるから，(11.39)は演算子の順序を変えても不変であることに注意しよう．そうすると，数演算子$\hat{\mathscr{N}}$の固有値が N であるような固有空間 $V_0^{(N)}$ の基底として，

$$\{\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle\ ;\ n_1\leqq n_2\leqq\cdots\leqq n_N\} \tag{11.40}$$

がとれることは明らかであろう．ところが，これは，(11.31)と形式的に同じ形をしている．いいかえると，調和振動子の空間 V_0 のうち，$\hat{\mathscr{N}}$の固有値が N であるもの全体 $V_0^{(N)}$ と，N ボソン系の状態空間 $V^N{}_{\mathrm{B}}$ の間には1対1対応がつけられる．具体的に，$V_0^{(N)}$ から $V^N{}_{\mathrm{B}}$ への線型写像 ρ を，

$$\rho(\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle)=\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \tag{11.41}$$

をみたすものとして定義しよう．上に述べたことより ρ は1対1対応であるが，さらに内積も保っていることが以下の例題のようにしてわかる．

例題1　(11.41)で定義される ρ が内積を保っていることを示せ．

解　$n_1\leqq n_2\leqq\cdots\leqq n_N$ に対して，$\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle$ のノルムと $\mathscr{S}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$ のノルムが等しいことを示せばよい．n_1, n_2, …, n_N がすべて異なるときは，どちらのノルムも明らかに1であり，確かに等しい．n_1, n_2, …, n_N のうちに同じものがあるときは，多少注意を要する．n_1, n_2, …, n_N のうち同じものをまとめて，m_1 が l_1 個，m_2 が l_2 個，…，m_q が l_q 個あったとする．ここで，$m_1<m_2<\cdots<m_q$, $l_1\geqq1$, $l_2\geqq1$, …, $l_q\geqq1$, $l_1+l_2+\cdots+l_q=N$ である．そうすると，

$$\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle=(\hat{a}^\dagger_{m_1})^{l_1}(\hat{a}^\dagger_{m_2})^{l_2}\cdots(\hat{a}^\dagger_{m_q})^{l_q}|0\rangle$$

であるから，そのノルムは，$l_1!\,l_2!\cdots l_q!$ に等しい．

一方，$\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$ のノルムは，(11.32)より，

$$\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in S_N}\sum_{\tau\in S_N}\langle\varphi_{n_{\sigma(1)}}|\varphi_{n_{\tau(1)}}\rangle\langle\varphi_{n_{\sigma(2)}}|\varphi_{n_{\tau(2)}}\rangle\cdots\langle\varphi_{n_{\sigma(N)}}|\varphi_{n_{\tau(N)}}\rangle$$

$$=\sum_{\sigma\in S_N}\langle\varphi_{n_1}|\varphi_{n_{\sigma(1)}}\rangle\langle\varphi_{n_2}|\varphi_{n_{\sigma(2)}}\rangle\cdots\langle\varphi_{n_N}|\varphi_{n_{\sigma(N)}}\rangle$$

となるが，右辺の $\sum$ のなかを1にするような置換 σ は，n_1, n_2, …, n_N のうちで同じものどうしを入れかえる置換であるから，全部で $l_1!\,l_2!\cdots l_q!$ だけある．よって，$\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_k}\rangle)$ のノルムも $l_1!\,l_2!\cdots l_q!$ であることがわかった．　∎

以上でみたように，N ボソン系の状態空間 $V^N{}_\mathrm{B}$ は，調和振動子の空間のうち$\hat{\mathscr{N}}$の固有値が N であるようなもの全体 $V_0^{(N)}$ と同型である．このような同型は数学的な偶然というよりも，むしろ，粒子の同種性の本性が何であるかを示しているきわめて基本的なものであることがしだいにわかってくるであろう．そのための第一歩として，ボソン系のハミルトニアンも生成・消滅演算子で書き表すことを考えよう．まず，ボソン系の状態空間を粒子数に対する制限のないものに拡張しておこう．すなわち，N ボソン系の状態空間 $V^N{}_\mathrm{B}$ の直和

$$V_\mathrm{B}=V^0{}_\mathrm{B}\oplus V^1{}_\mathrm{B}\oplus V^2{}_\mathrm{B}\oplus V^3{}_\mathrm{B}\oplus\cdots \tag{11.42}$$

を考えるわけである．ここで，右辺の$V^0{}_\mathrm{B}$ はボソンが1つもない状態を表す1次元のベクトル空間である．そうすると，対応(11.41)によってボソンの状態空間 V_B と調和振動子の空間 V_0 は完全に同一視されるから，生成・消滅演算子をボソンの多体系に働くものとみなすことができる．

実際，生成演算子 $\hat{a}_n^\dagger$ は，空間 V_0 の上で，

$$\hat{a}_n^\dagger(\hat{a}_{n_1}^\dagger\hat{a}_{n_2}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle)=\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_{n_1}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle \tag{11.43}$$

のように働いているから，対応(11.41)によってこれを V_B 上の演算子とみなすと，

$$\begin{aligned}&\hat{a}_n^\dagger\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\ &=\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_n\rangle|\varphi_{n_1}\rangle\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned} \tag{11.44}$$

となる [1]．すなわち，演算子 $\hat{a}_n^\dagger$はボソン系に状態$|\varphi_n\rangle$の粒子を1つつけ加える作用，すなわち状態$|\varphi_n\rangle$の粒子を1つ生成する演算子である．一方，$\hat{a}_n$ は V_0 上で，

$$\begin{aligned}&\hat{a}_n(\hat{a}_{n_1}^\dagger\hat{a}_{n_2}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle)\\ &=\sum_{j=1}^N\delta_{n,n_j}\hat{a}_{n_1}^\dagger\cdots\underset{j}{\wedge}\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle\end{aligned} \tag{11.45}$$

のように作用している．ここで，右辺の記号 $\cdots\underset{j}{\wedge}\cdots$ は j 番目のもの，すなわち $\hat{a}_{n_j}^\dagger$ をとり除くことを意味している．これを対応(11.41)によって V_B 上の演算子とみなすと，

$$\begin{aligned}&\hat{a}_n\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\ &=\sum_{j=1}^N\delta_{n,n_j}\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{j}{\wedge}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned} \tag{11.46}$$

となり，$\hat{a}_n$ は，状態$|\varphi_n\rangle$の粒子を1つ消滅させる演算子であることがわかる．

つぎに，$\hat{a}_n^\dagger$，$\hat{a}_m$ に関して双1次であるような演算子 $\hat{O}^{(1)}$

---

1) 厳密にいうと，(11.44)の左辺の $\hat{a}_n{}^\dagger$ は $\rho\hat{a}_n{}^\dagger\rho^{-1}$ と書くべきかもしれないが，ここでは簡単のため $\hat{a}_n{}^\dagger$ と書いた．

$$\hat{O}^{(1)}=\sum_{n,m}\hat{a}_n^\dagger o_{n,m}^{(1)}\hat{a}_m \tag{11.47}$$

を考えよう．ここで，$o_{n,m}^{(1)}$ は任意の複素数である．このような演算子は粒子数を変化させないから，N 粒子の状態空間 $V^N{}_\mathrm{B}$ に働く演算子として解釈できるはずである．交換子に関する恒等式

$$\begin{aligned}&[\hat{A},\hat{B}_1\hat{B}_2\cdots\hat{B}_n]\\&=[\hat{A},\hat{B}_1]\hat{B}_2\cdots\hat{B}_n+\hat{B}_1[\hat{A},\hat{B}_2]\hat{B}_3\cdots\hat{B}_n+\cdots\\&\quad\cdots+\hat{B}_1\hat{B}_2\cdots\hat{B}_{n-1}[\hat{A},\hat{B}_n]\end{aligned} \tag{11.48}$$

および，

$$[\hat{O}^{(1)},\hat{a}_k^\dagger]=\sum_n o_{n,k}^{(1)}\hat{a}_n^\dagger \tag{11.49}$$

$$\hat{O}^{(1)}|0\rangle=0 \tag{11.50}$$

であることを使うと，簡単な計算により，

$$\begin{aligned}&\hat{O}^{(1)}\hat{a}_{n_1}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle\\&=\left(\sum_n o_{n,n_1}^{(1)}\hat{a}_n^\dagger\right)\hat{a}_{n_2}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle\\&+\hat{a}_1^\dagger(\sum_n o_{n,n_2}^{(1)}\hat{a}_n^\dagger)\hat{a}_{n_3}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle\\&+\cdots\cdots\\&+\hat{a}_1^\dagger\cdots\hat{a}_{n_{N-1}}^\dagger(\sum_n o_{n,n_N}^{(1)}\hat{a}_n^\dagger)|0\rangle\end{aligned} \tag{11.51}$$

となることがわかる．

(11.41)の対応により，これをボソンの N 粒子系の状態ベクトルに対するものとみなすと，

$$\begin{aligned}&\hat{O}^{(1)}\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&\;=\hat{\mathscr{S}}\{(\sum_n o_{n,n_1}^{(1)}|\varphi_n\rangle)|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&\qquad+|\varphi_{n_1}\rangle(\sum_n o_{n,n_2}^{(1)}|\varphi_n\rangle)|\varphi_{n_3}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&\qquad+\cdots\cdots\\&\qquad+|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_{N-1}}\rangle(\sum_n o_{n,n_N}^{(1)}|\varphi_n\rangle)\}\end{aligned} \tag{11.52}$$

となる．ここで，1 粒子の状態空間 V 上の演算子 $\hat{o}^{(1)}$ を，

$$\hat{o}^{(1)}|\varphi_n\rangle=\sum_m o_{m,n}^{(1)}|\varphi_m\rangle \tag{11.53}$$

で定義すると，(11.52)は，

$$\begin{aligned}\text{(11.52)の右辺}=\hat{\mathscr{S}}\{&(\hat{o}^{(1)}|\varphi_{n_1}\rangle)|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&+|\varphi_{n_1}\rangle(\hat{o}^{(1)}|\varphi_{n_2}\rangle)|\varphi_{n_3}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle\\&+\cdots\end{aligned}$$

$$+|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots(\hat{o}^{(1)}|\varphi_{n_N}\rangle)\} \qquad (11.54)$$

$$=\hat{\mathscr{S}}((\sum_{i=1}^{N}\hat{o}_i^{(1)})|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$$

と書ける．ここで，$\hat{o}_i^{(1)}$ は，i 番目の粒子に働く演算子 $\hat{o}^{(1)}$ である．すなわち，

$$\hat{o}_i^{(1)}|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle=|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots(\hat{o}^{(1)}|\varphi_{n_i}\rangle)\cdots|\varphi_{n_N}\rangle \qquad (11.55)$$

であり，$\sum_{i=1}^{N}\hat{o}_i^{(1)}$ は，各粒子に働く1体演算子の和である．これは前節(11.20)で考えたようなものであり，粒子間の相互作用を無視したときのハミルトニアンはこのような形に書ける．このように，1体の演算子の和として書けるような演算子のことも単に1体の演算子とよぶことにしよう．けっきょく，1体の演算子 $\sum_{i=1}^{N}\hat{o}_i^{(1)}$ を生成・消滅演算子で表示すると，双1次な形 $\sum_{n,m}\hat{a}_n^\dagger\langle\varphi_n|\hat{o}^{(1)}|\varphi_m\rangle\hat{a}_m$ に書けることがわかった．

つぎの例題に示すように，2体以上の演算子に対しても同様の対応が成り立つ．

例題2 2体の状態空間に働く演算子 $\hat{o}^{(2)}$

$$\hat{o}^{(2)}|\varphi_n\rangle|\varphi_m\rangle=\sum_{a,b}o_{ab\,;\,nm}^{(2)}|\varphi_a\rangle|\varphi_b\rangle$$

を考える．N 粒子系の i 番目と j 番目の粒子に演算子 $\hat{o}^{(2)}$ が働くとき，それを $\hat{o}_{ij}^{(2)}$ と書こう．すなわち，

$$\hat{o}_{ij}^{(2)}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle$$

$$=\sum_{a,b}o_{ab\,;\,n_in_j}^{(2)}|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{\substack{\uparrow\\ i\text{番目}}}{|\varphi_a\rangle}\cdots\underset{\substack{\uparrow\\ j\text{番目}}}{|\varphi_b\rangle}\cdots|\varphi_{nN}\rangle$$

とする．N 個の粒子のすべての対の間に $\hat{o}^{(2)}$ が働くとして，

$$\hat{O}^{(2)}=\sum_{1\le i<j\le N}\hat{o}_{ij}^{(2)}$$

という演算子を考える(たとえば，N 粒子系の間に働くCoulomb力などはこう書ける)．また，2体の演算子 $\hat{o}^{(2)}$ は2つの粒子の入れかえに対して不変である，すなわち，

$$o_{ab\,;\,mn}^{(2)}=o_{ba\,;\,nm}^{(2)}$$

がみたされているとする．

$\hat{O}^{(2)}$ を生成・消滅演算子で表すと，

$$\hat{O}^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{a,b,n,m}\hat{a}_a^\dagger\hat{a}_b^\dagger o_{ab\,;\,nm}^{(2)}\hat{a}_m\hat{a}_n \qquad ①$$

となることを示せ．3体の演算子のときはどうか．

解 ①の形の $\hat{O}^{(2)}$ を $\hat{a}_{n_1}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle$ に作用させると，少し計算したのち，

$$\hat{O}^{(2)}\hat{a}_{n_1}^\dagger\cdots\hat{a}_{n_N}^\dagger|0\rangle$$

$$= \sum_{1\le i<j\le N} \sum_{a,b} o^{(2)}_{ab\,;\,n_i n_j} \hat{a}^\dagger_{n_1} \cdots \underset{\substack{\uparrow \\ i\text{番目}}}{\hat{a}^\dagger_a} \cdots \underset{\substack{\uparrow \\ j\text{番目}}}{\hat{a}^\dagger_b} \cdots \hat{a}^\dagger_{n_N} |0\rangle$$

が得られる．ここで，2 体の演算子 $\hat{o}^{(2)}$ が 2 つの粒子の入れかえと可換である条件

$$o^{(2)}_{ab\,;\,mn} = o^{(2)}_{ba\,;\,nm}$$

を使った．$\hat{a}^\dagger_{n_1} \cdots \hat{a}^\dagger_{n_N} |0\rangle$ を $\hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle \cdots |\varphi_{n_N}\rangle)$ とみなすと，

$$\begin{aligned}
&\hat{O}^{(2)} \hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle \cdots |\varphi_{n_N}\rangle) \\
&\quad = \hat{\mathscr{S}}\Big(\sum_{1\le i<j\le N} \sum_{a,b} o^{(2)}_{ab\,;\,n_i n_j} |\varphi_{n_1}\rangle \cdots \underset{\substack{\uparrow \\ i\text{番目}}}{|\varphi_a\rangle} \cdots \underset{\substack{\uparrow \\ j\text{番目}}}{|\varphi_b\rangle} \cdots |\varphi_{n_N}\rangle\Big) \\
&\quad = \hat{\mathscr{S}}\Big(\sum_{1\le i<j\le N} \hat{o}^{(2)}_{ij} (|\varphi_{n_1}\rangle |\varphi_{n_2}\rangle \cdots |\varphi_{n_N}\rangle)\Big) \\
&\quad = \sum_{1\le i<j\le N} \hat{o}^{(2)}_{ij}\, \hat{\mathscr{S}}(|\varphi_{n_1}\rangle |\varphi_{n_2}\rangle \cdots |\varphi_{n_N}\rangle)
\end{aligned}$$

となり，主張が確かめられた．

3 体の演算子 $\hat{O}^{(3)} = \sum_{1\le i<j<k\le N} \hat{o}^{(3)}_{ijk}$ に対しても同様の議論をくりかえすと，

$$\hat{O}^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{a,b,c,k,l,m} \hat{a}^\dagger_a \hat{a}^\dagger_b \hat{a}^\dagger_c\ o^{(3)}_{abc\,;\,klm} a_m a_l a_k$$

と書けることがわかる．ここで，$o^{(3)}_{abc\,;\,klm}$ は 3 体の演算子の行列要素であり，

$$\hat{o}^{(3)} |\varphi_k\rangle |\varphi_l\rangle |\varphi_m\rangle = \sum_{a,b,c} o^{(3)}_{abc\,;\,klm} |\varphi_a\rangle |\varphi_b\rangle |\varphi_c\rangle$$

で定義される． ∎

以上で得られたことをまとめておこう．

N 個の同種のボソンからなる系は，等価であるが一見異なった 2 つの方法で記述できる．第 1 の方法では，状態空間を構成するために，1 粒子の状態空間の N 個のテンソル積を考え，それを粒子の入れかに対して完全対称なものへ制限する．このような多体系のとり扱いを第一量子化とよぶ．第 2 の方法では，粒子の生成・消滅演算子を考え，粒子が 1 つもない状態に生成演算子を N 個作用させた状態として N 体系を記述する．このような多体系のとり扱いを第二量子化とよぶ．第一量子化で 1 体，2 体，3 体，…の演算子の和として表されるような演算子は，第二量子化では生成演算子と消滅演算子に関して双 1 次，双 2 次，双 3 次，…の演算子として表される．

(b) ボソンの場の演算子

第二量子化の物理的な意味を調べるために，具体例として Coulomb 相互作用をしているスピン 0 のボソンを考えよう．そのようなボソンが N 個あるときのハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m}+\sum_{1\leq i<j\leq N}\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i-\hat{\boldsymbol{r}}_j|} \tag{11.56}$$

と書ける．1粒子系の正規直交基底として座標表示のケット $\{|\boldsymbol{r}\rangle ; \boldsymbol{r}\in\mathbf{R}^3\}$ をとろう．そうすると，対応する生成・消滅演算子は $|\boldsymbol{r}\rangle$ と同じ変数，すなわち空間座標でラベルされることになる．生成演算子を $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$，消滅演算子を $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ と書くことにすると，(11.33)に対応して，それらは，交換関係

$$\begin{aligned}&[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')]=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\\&[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')]=0,\ \ [\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')]=0\end{aligned} \tag{11.57}$$

をみたす．

ハミルトニアン $\hat{H}$ の1体部分は，

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m} \tag{11.58}$$

であるから，その第二量子化による表示は，(11.47)より，

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(1)}&=\int d^3r\int d^3r'\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\langle\boldsymbol{r}|\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}|\boldsymbol{r}'\rangle\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\\&=\int d^3r\,\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}))\cdot(\nabla\hat{\psi}(\boldsymbol{r}))\end{aligned} \tag{11.59}$$

と書ける．一方，ハミルトニアン $\hat{H}$ の2体部分は，

$$\hat{H}^{(2)}=\sum_{1\leq i<j\leq N}\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i-\hat{\boldsymbol{r}}_j|} \tag{11.60}$$

であるから，その第二量子化による表示は，例題2の①より，

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(2)}&=\frac{1}{2}\int d^3r\ d^3r'\ d^3r''\ d^3r'''\ \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\cdot\\&\quad\cdot{}_1\langle\boldsymbol{r}|_2\langle\boldsymbol{r}'|\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2|}|\boldsymbol{r}''\rangle_1|\boldsymbol{r}'''\rangle_2\hat{\psi}(\boldsymbol{r}'')\hat{\psi}(\boldsymbol{r}''')\\&=\frac{1}{2}\int d^3r\ d^3r'\ \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{11.61}$$

となることがわかる．$\hat{H}^{(1)}$ と $\hat{H}^{(2)}$ の和をとることにより，けっきょくハミルトニアンが，

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int d^3r\,\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\hat{\psi}^\dagger)(\nabla\hat{\psi})\\&\quad+\frac{1}{2}\int d^3r\ d^3r'\ \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{11.62}$$

と書けることがわかった．

つぎに，粒子数密度の演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_i) \tag{11.63}$$

を考えよう．これは，第一量子化の立場では1体の演算子の和であるから，その第二量子化による表示は(11.47)より，

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(\boldsymbol{r})&=\int d^3r'\,d^3r''\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'|\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}''\rangle\hat{\psi}(\boldsymbol{r}'')\\&=\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{11.64}$$

であることがわかる．これから $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ と $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')$ の交換子を計算すると，

$$[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')]=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}') \tag{11.65}$$

となるが，これは，$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ が位置 $\boldsymbol{r}$ のところに粒子を1つ生成する演算子であることを思い出すと自然と思われる．また，空間内に存在する全粒子数の演算子 $\hat{\mathscr{N}}$ は，

$$\hat{\mathscr{N}}=\int d^3r\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})=\int d^3r\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \tag{11.66}$$

となるが，これは，(11.35)と一致している．ハミルトニアンの2体部分(11.61)において，演算子の順序をあまり気にかけなければ(もちろん正しくないが)，

$$\hat{H}^{(2)}\sim\frac{1}{2}\int d^3r\,d^3r'\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\hat{\rho}(\boldsymbol{r}') \tag{11.67}$$

となる．すなわち，$\hat{H}^{(2)}$ はCoulomb斥力による自己エネルギーと解釈できることに注意しよう．

このように，場の演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$，$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ は単なる形式上のものではなくて，何らかの実体をになっているようにみえる．実際，つぎの例題で示すように，ハミルトニアン(11.62)は，スカラー場を量子化したときに現れるものとみなすことができる．場の量子化については第14章でくわしく議論するが，同種粒子の統計性のような一見不可思議にみえる性質は量子化された場のふるまいとして自然に理解できる．

例題3 作用が，

$$S=\int dt\int d^3r\left(i\hbar\psi^*\dot{\psi}-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)\right) \tag{①}$$

で与えられる複素スカラー場 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を考える．

(1) 古典場としての運動方程式を導け．

(2) 正準量子化せよ．

解 (1) ψ^* について変分すると，

$$i\hbar\dot{\psi}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi=0$$

が得られるが，これは，Schrödinger方程式と同じ形である．

(2) 作用が，

$$S=\int dt\left\{\sum_{i=1}^{f}p_i\dot{q}_i-H(p,q)\right\} \qquad ⓐ$$

のように書けているときは，p_i と q_i が正準共役量であり，$H(p,\ q)$ がハミルトニアンであったことを思い出そう．①とⓐを

$$\begin{aligned}S&=\int dt\left\{\int d^3r(i\hbar\psi^*)\dot{\psi}-\int d^3r\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)\right\}\\ &\qquad\quad\ \updownarrow\qquad\quad\ \updownarrow\quad\ \ \updownarrow\qquad\qquad\qquad\updownarrow\\ S&=\int dt\left\{\ \sum_{i=1}^{f}\quad p_i\quad\ \dot{q}_i-\qquad\qquad H\qquad\qquad\right\}\end{aligned} \qquad ⓑ$$

のように並べて書いてみれば明らかなように，$i\hbar\psi^*$ は ψ の正準運動量である．$\hat{p}_i$ と $\hat{q}_j$ の間の正準交換関係

$$[\hat{q}_i,\hat{q}_j]=0,\ \ [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\ \ [\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

において，$\hat{q}_i$ を $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ に，$\hat{p}_j$ を $i\hbar\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')$ におきかえ，δ_{ij} を $\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ におきかえると，

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')]=0,\ \ [\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')]=0$$
$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')^\dagger]=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

が得られる．また，ハミルトニアンはⓑの対応から明らかに，

$$\hat{H}=\int d^3r\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\hat{\psi}^\dagger)\cdot(\nabla\hat{\psi})$$

となり，(11.57)および(11.59)が得られる．すなわち，ボソンの多体系(11.59)は実は作用①に従う古典場を量子化した結果出てくるものと同じである(ここでは，煩雑さを避けるために，あたかも ψ と ψ^* が独立な実変数であるかのように扱ったが，ψ を実部と虚部に分けて正直にやっても同じ結論が得られる)． ∎

(c) フェルミオンの第二量子化

ある種類のフェルミオンが1つだけあるときの状態空間を V とし，その正規直交基底を $\{|\varphi_n\rangle\,;\,n=1,\ 2,\ \cdots\}$ としよう．前節でみたように，このフェルミオンが N 個あるときの状態空間 $V^N{}_{\mathrm{F}}$ は，N 個の V のテンソル積を粒子の入れかえに対して完全反対称なものに制限したものであり，

$$\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\qquad(n_1<n_2<\cdots<n_N) \tag{11.68}$$

の形の状態ベクトルではられる．ここで，$\hat{\mathscr{A}}$は反対称化の演算子であり，

$$\begin{aligned}&\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\ &=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in S_N}\mathrm{sgn}(\sigma)|\varphi_{n_{\sigma(1)}}\rangle\cdots|\varphi_{n_{\sigma(N)}}\rangle\end{aligned} \tag{11.69}$$

で定義される．$N=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ に対する状態空間 $V^N{}_{\mathrm{F}}$ の直和をとることによって，粒子数に対して制限のない状態空間 V_{F} をつくろう．

$$V_F = V^0{}_F \oplus V^1{}_F \oplus V^2{}_F \oplus \cdots \tag{11.70}$$

ここで，$V^0{}_F$は形式的に導入したものであり，粒子が1つもない状態を示す1次元ベクトル空間である．

状態$|\varphi_n\rangle$の粒子を1つ生成する演算子 $\hat{a}_n^\dagger$ をつぎの式によって V_F に作用するものとして定義しよう．

$$\begin{aligned} &\hat{a}_n{}^\dagger \hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \\ &\quad= \hat{\mathscr{A}}(|\varphi_n\rangle|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \end{aligned} \tag{11.71}$$

生成演算子 $\hat{a}_n{}^\dagger$ のエルミート共役を $\hat{a}_n$ とすると，つぎの例題に示すように，

$$\begin{aligned} &\hat{a}_n \hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \\ &\quad= \sum_{i=1}^{N} \delta_{n,n_i}(-1)^{i-1}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{i}{\wedge}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle) \end{aligned} \tag{11.72}$$

であることがわかる．ここで，右辺の $\cdots\underset{i}{\wedge}\cdots$ という記号は，i 番目のもの，すなわち$|\varphi_{n_i}\rangle$をとり除くことを意味する．この演算子は状態$|\varphi_n\rangle$にある粒子を1つ消滅させる演算子であるから消滅演算子とよぶ．

例題 4 (11.72)を示せ．

解 式をみやすくするために，$\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$ を $|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle$と書こう．$\hat{a}_n^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle$ と $|m_1, m_2, \cdots, m_{N+1}\rangle$の内積は，

$$\begin{aligned} &\langle m_1, m_2, \cdots, m_{N+1}|(\hat{a}_n^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle) \\ &= \langle m_1, m_2, \cdots, m_{N+1}|n, n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle \end{aligned} \quad \text{ⓐ}$$

であるから，これがゼロでないのは，m_1，m_2，…，m_{N+1} が n，n_1…，n_N の適当な置換になっているときである．とくに n は m_1，…，m_{N+1} のどれかに等しいはずであるが，$n=m_1$ のときは，

$$\text{ⓐの右辺} = \langle m_2, \cdots, m_{N+1}|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle,$$

$n=m_2$ のときは，

$$\text{ⓐの右辺} = -\langle m_1, m_3, \cdots, m_{N+1}|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle,$$

という具合に，順に符号が変化するから，けっきょく

$$\text{ⓐの右辺} = \sum_{i=1}^{N+1} \delta_{m_i,n}(-1)^{i-1}\langle m_1, \cdots\underset{i}{\wedge}\cdots, m_{N+1}|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle$$

であることがわかる．これが$(\hat{a}_n|m_1, \cdots, m_{N+1}\rangle)^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle$ に等しいはずであるから，けっきょく

$$\hat{a}_n|m_1, \cdots, m_{N+1}\rangle = \sum_{i=1}^{N+1} \delta_{m_i,n}(-1)^{i-1}|m_1, \cdots\underset{i}{\wedge}\cdots, m_{N+1}\rangle$$

であること，すなわち(11.72)が示された． ▮

(11.71)と(11.72)を使って $\hat{a}_n$ と $\hat{a}_m^\dagger$ の積を計算すると,

$$\begin{aligned}&\hat{a}_n\hat{a}_m^\dagger\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\hat{a}_n\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_m\rangle|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\delta_{n,m}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&\quad+\sum_{i=1}^{N}\delta_{n,n_i}(-1)^i\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_m\rangle|\varphi_{n_1}\rangle\underset{|\varphi_{n_i}\rangle\text{を除く}}{\cdots\wedge\cdots}|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned}\tag{11.73a}$$

および

$$\begin{aligned}&\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\hat{a}_m^\dagger\sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\delta_{n,n_i}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\underset{|\varphi_{n_i}\rangle\text{を除く}}{\cdots\wedge\cdots}|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\delta_{n,n_i}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_m\rangle|\varphi_{n_1}\rangle\underset{|\varphi_{n_i}\rangle\text{を除く}}{\cdots\wedge\cdots}|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned}\tag{11.73b}$$

が得られる. (11.73a)と(11.73b)を辺々加えると,

$$\begin{aligned}&(\hat{a}_n\hat{a}_m^\dagger+\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n)\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\delta_{n,m}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned}\tag{11.74}$$

となるから,

$$\hat{a}_n\hat{a}_m^\dagger+\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n=\delta_{n,m}\tag{11.75}$$

であることがわかった. 同様に, 今度は $\hat{a}_n^\dagger$ と $\hat{a}_m^\dagger$ の積を計算すると,

$$\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_m^\dagger\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_n\rangle|\varphi_m\rangle|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\tag{11.76a}$$

$$\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_m\rangle|\varphi_n\rangle|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\tag{11.76b}$$

となるから, $\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_n\rangle|\varphi_m\rangle\cdots)=-\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_m\rangle|\varphi_n\rangle\cdots)$ に注意すると,

$$\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_m^\dagger+\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger=0\tag{11.77}$$

であることがわかる. また, このエルミート共役をとると,

$$\hat{a}_n\hat{a}_m+\hat{a}_m\hat{a}_n=0\tag{11.78}$$

であることもわかる. けっきょく, フェルミオンの生成・消滅演算子は, (11.75), (11.77), (11.78)のような反交換関係をみたしていることがわかった.

ここまでの議論では, 粒子が1つもない状態 $V^0{}_{\mathrm{F}}$ をあまり注意深く扱ってこなかった. 1次元空間 $V^0{}_{\mathrm{F}}$ の規格化されたベクトルを $|0\rangle$ と書くことにしよう. これは粒子が1つもないという状態であり, 1粒子状態 $|\varphi_n\rangle$ と混同してはいけない. $|0\rangle$ に対する生成演算子の作用を,

$$\hat{a}_n^\dagger|0\rangle=|\varphi_n\rangle(=\hat{\mathscr{A}}|\varphi_n\rangle)\tag{11.79}$$

で定義すると, $\hat{a}_n$ が $\hat{a}_n^\dagger$ のエルミート共役であるためには,

$$\hat{a}_m|\varphi_n\rangle=\delta_{n,m}|0\rangle\tag{11.80}$$

とすればよいことがわかる．最後に，$|0\rangle$に対する消滅演算子の作用を，

$$\hat{a}_m|0\rangle=0 \tag{11.81}$$

と定義すると，容易にわかるように反交換関係(11.75)，(11.77)，(11.78)は状態空間 V_F の全域で成立するようになる．このようにして，状態$|0\rangle$を定義しておくと，任意の状態$\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$は，

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)&=\hat{a}^\dagger_{n_1}\mathscr{A}(|\varphi_{n_2}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=\cdots\\&=\hat{a}^\dagger_{n_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_{N-1}}|\varphi_{n_N}\rangle=\hat{a}^\dagger_{n_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle\end{aligned} \tag{11.82}$$

のように$|0\rangle$に生成演算子をいくつかかけた状態として表される．

つぎに，粒子数演算子$\hat{\mathscr{N}}$をボソンのときと同様に，

$$\hat{\mathscr{N}}=\sum_n\hat{a}^\dagger_n\hat{a}_n \tag{11.83}$$

で定義しよう．そうすると，$\hat{\mathscr{N}}|0\rangle=0$ は自明であり，さらに，

$$\begin{aligned}[\hat{\mathscr{N}},\hat{a}^\dagger_m]&=\sum_n(\hat{a}^\dagger_n\hat{a}_n\hat{a}^\dagger_m-\hat{a}^\dagger_m\hat{a}^\dagger_n\hat{a}_n)\\&=\sum_n(\hat{a}^\dagger_n\hat{a}_n\hat{a}^\dagger_m+\hat{a}^\dagger_n\hat{a}^\dagger_m\hat{a}_n)\\&=\sum_n\hat{a}^\dagger_n(\hat{a}_n\hat{a}^\dagger_m+\hat{a}^\dagger_m\hat{a}_n)\\&=\hat{a}^\dagger_m\end{aligned} \tag{11.84}$$

が成り立つから，ボソンのときと同様$\hat{\mathscr{N}}$は$|0\rangle$にいくつ生成演算子がかかっているかを数える演算子であり，その固有値はフェルミオンの数を表している．

いまの場合もボソンのときと同様に，生成演算子と消滅演算子の双1次，双2次，双3次,…であるような演算子を考えることができる．フェルミオンの場合もやはり，そのような演算子を第一量子化の立場でみると，1体，2体，3体,…の演算子となっていることをつぎの例題で調べよう．

例題 5　フェルミオンの多体系を第二量子化したとき，1体の演算子 $\hat{O}^{(1)}=\sum_{i=1}^N\hat{o}^{(1)}_i$, 2体の演算子 $\hat{O}^{(2)}=\sum_{1\leq i<j\leq N}\hat{o}^{(2)}_{ij}$, 3体の演算子 $\hat{O}^{(3)}=\sum_{1\leq i<j<k\leq N}\hat{o}^{(3)}_{ijk}$ はどのように表されるか．

解　(i)　1体の演算子 $\hat{O}^{(1)}$を$\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$に作用させて変形すると，

$$\begin{aligned}\hat{O}^{(1)}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)&=\hat{\mathscr{A}}(\hat{O}^{(1)}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle))\\&=\hat{\mathscr{A}}(\sum_{i=1}^N|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{\substack{\uparrow\\ i\text{番目}}}{(\hat{o}|\varphi_{n_i}\rangle)}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\\&=\hat{\mathscr{A}}(\sum_{i=1}^N|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underbrace{(\sum_a\langle\varphi_a|\hat{o}|\varphi_{n_i}\rangle|\varphi_a\rangle)}_{\substack{\uparrow\\ i\text{番目}}}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)\end{aligned}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\underbrace{(\sum_a\langle\varphi_a|\hat{o}|\varphi_{n_i}\rangle\hat{a}^\dagger_a)}_{\uparrow\ i\text{番目}}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle$$

$$=(\sum_{a,b}\hat{a}^\dagger_a\langle\varphi_a|\hat{o}|\varphi_b\rangle\hat{a}_b)\hat{a}^\dagger_{n_1}\hat{a}^\dagger_{n_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle$$

と書ける((11.48)から(11.51)を参照せよ). よって, 対応する第二量子化の演算子は,

$$\hat{O}^{(1)}=\sum_{a,b}\hat{a}^\dagger_a\langle\varphi_a|\hat{o}|\varphi_b\rangle\hat{a}_b \tag{11.85a}$$

である.

(ii) 2体の演算子 $\hat{O}^{(2)}=\sum_{1\leq i<j\leq N}\hat{o}^{(2)}_{ij}$ を$\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$に作用させると,

$$\hat{O}^{(2)}\hat{\mathscr{A}}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)=\hat{\mathscr{A}}(\hat{O}^{(2)}(|\varphi_{n_1}\rangle\cdots|\varphi_{n_N}\rangle))$$

$$=\hat{\mathscr{A}}(\sum_{1\leq i<j\leq N}(\langle\varphi_a|\langle\varphi_b|\hat{o}^{(2)}|\varphi_{n_i}\rangle|\varphi_{n_j}\rangle)|\varphi_{n_1}\rangle\cdots\underset{\uparrow\ i\text{番目}}{|\varphi_a\rangle}\cdots\underset{\uparrow\ j\text{番目}}{|\varphi_b\rangle}\cdots|\varphi_{n_N}\rangle)$$

$$=\sum_{1\leq i<j\leq N}(\langle\varphi_a|\langle\varphi_b|\hat{o}^{(2)}|\varphi_{n_i}\rangle|\varphi_{n_j}\rangle)\hat{a}^\dagger_{n_1}\cdots\underset{\uparrow\ i\text{番目}}{\hat{a}^\dagger_a}\cdots\cdots\underset{\uparrow\ j\text{番目}}{\hat{a}^\dagger_b}\cdots\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle$$

$$=\left(\frac{1}{2}\sum_{a,b,k,l}\hat{a}^\dagger_a\hat{a}^\dagger_b(\langle\varphi_a|\langle\varphi_b|\hat{o}^{(2)}|\varphi_k\rangle|\varphi_l\rangle)\hat{a}_l\hat{a}_k\right)\hat{a}^\dagger_{n_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{n_N}|0\rangle$$

と書ける. よって, 第二量子化による表示は,

$$\hat{O}^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{a,b,k,l}\hat{a}^\dagger_a\hat{a}^\dagger_b({}_1\langle\varphi_a|{}_2\langle\varphi_b|\hat{o}^{(2)}|\varphi_k\rangle_1|\varphi_l\rangle_2)\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{11.85b}$$

となる. ここで, $\hat{o}^{(2)}$の行列要素の混乱を避けるために, 2体系のケットを1, 2でラベルしておいた. そうすると, ${}_1\langle\varphi_a|{}_2\langle\varphi_b|=(|\varphi_a\rangle_1|\varphi_b\rangle_2)^\dagger$であることがよくわかるであろう.

(iii) 同様にして, 3体の演算子は,

$$\hat{O}^{(3)}=\frac{1}{6}\sum_{a,b,c,k,l,m}\hat{a}^\dagger_a\hat{a}^\dagger_b\hat{a}^\dagger_c({}_1\langle\varphi_a|{}_2\langle\varphi_b|{}_3\langle\varphi_c|\hat{o}^{(3)}|\varphi_k\rangle_1|\varphi_l\rangle_2|\varphi_m\rangle_3)\hat{a}_m\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{11.85c}$$

と書けることがわかる. ▮

(d) フェルミオンの場の演算子

フェルミオンの第二量子化の例として, 外場のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 中にあり, おたがいにCoulomb相互作用しているスピン$\frac{1}{2}$の粒子を考えよう. この場合, N粒子系のハミルトニアンは,

$$\hat{H}=\hat{H}^{(1)}+\hat{H}^{(2)}$$

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m}+V(\hat{\boldsymbol{r}}_i)\right)$$
$$\hat{H}^{(2)}=\sum_{1\leq i<j\leq N}\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i-\hat{\boldsymbol{r}}_j|} \tag{11.86}$$

で与えられる．1粒子系の状態空間の正規直交基底として $\left\{|\boldsymbol{r}\,;\alpha\rangle\,;\boldsymbol{r}\in\mathbf{R}^3,\ \alpha=\pm\frac{1}{2}\right\}$ をとろう．ここで，α はスピンの z 成分の固有値としよう．これに対応して，$\boldsymbol{r}$ と α でラベルされる生成・消滅演算子 $\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r})$, $\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})$ を考えると，反交換関係(11.75)，(11.77)，(11.78)は，

$$\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}_\beta^\dagger(\boldsymbol{r}')\}=\delta_{\alpha\beta}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$
$$\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}')\}=0,\quad\{\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}_\beta^\dagger(\boldsymbol{r}')\}=0 \tag{11.87}$$

と書ける．ここで，記号{　,　}は，反交換子とよばれているものであり，$\{\hat{A},\ \hat{B}\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ で定義される．

ハミルトニアンの1体部分 $\hat{H}^{(1)}$ および2体部分 $\hat{H}^{(2)}$ を例題5の結果を用いて第二量子化すると，

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_{\alpha,\beta}\int d^3r\ d^3r'\ \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r})\langle\boldsymbol{r}\,;\alpha|\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\hat{\boldsymbol{r}})\right)|\boldsymbol{r}'\,;\beta\rangle\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}')$$
$$=\sum_\alpha\int d^3r\left\{\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\hat{\psi}_\alpha^\dagger)\cdot(\nabla\hat{\psi}_\alpha)+V(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})\right\} \tag{11.88a}$$

および，

$$\hat{H}^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}\int d^3r_1\ d^3r_2\ d^3r_1'\ d^3r_2'\ \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}_\beta^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\cdot$$
$$\cdot{}_1\langle\boldsymbol{r}_1\,;\alpha|{}_2\langle\boldsymbol{r}_2\,;\beta|\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2|}|\boldsymbol{r}_1'\,;\alpha'\rangle_1|\boldsymbol{r}_2'\,;\beta'\rangle_2\cdot\hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{r}'_2)\hat{\psi}_{\alpha'}(\boldsymbol{r}'_1)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\int d^3r_1\ d^3r_2\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}_\beta^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}_1) \tag{11.88b}$$

が得られる．また，粒子数密度の演算子

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_i) \tag{11.89}$$

は，1体の演算子の和であるから，上と同様に例題5の結果を使うと，

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r})=\sum_{\alpha,\beta}\int d^3r'd^3r''\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'\,;\alpha|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}''\,;\beta\rangle\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}'')$$
$$=\sum_\alpha\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{11.90}$$

が得られる．これを(11.88b)と見くらべてみると，いまの場合もやはり，$\hat{H}^{(2)}$ は大まかにいって Coulomb 斥力による静電エネルギーとみなせることがわかるだろ

う．

以上みてきたように，粒子がボソンであるということは場の演算子が，交換関係(11.57)をみたすということであり，粒子がフェルミオンであるということは，場の演算子が反交換関係(11.87)をみたすということにほかならない．それでは，異種の粒子の場の演算子の間にはどのような交換関係を設定するべきであろうか．

具体的に議論するために，AとBという2種類の粒子からなる系を考え，Aはボソンであり，Bはフェルミオンであるとしよう．Aという粒子が1つあるときの状態空間 V_A の正規直交基底を $\{|\xi_n\rangle\,;\, n=1,\,2,\,\cdots\}$ とし，Bについても同様に1粒子の状態空間 V_B の正規直交基底を $\{|\eta_n\rangle\,;\, n=1,\,2,\,\cdots\}$ とする．そうすると，N_A 個の粒子Aと N_B 個の粒子Bからなる系の状態空間は，N_A 個の V_A と N_B 個の V_B のテンソル積

$$\underbrace{V_\mathrm{A}\otimes\cdots\otimes V_\mathrm{A}}_{N_\mathrm{A}\,\text{個}}\otimes\underbrace{V_\mathrm{B}\otimes\cdots\otimes V_\mathrm{B}}_{N_\mathrm{B}\,\text{個}} \tag{11.91}$$

を考え，それを粒子Aの入れかえに対しては完全対称であり，粒子Bの入れかえに対しては完全反対称なものに制限することにより得られる．前節と同様の議論をくりかえすと，このような状態空間の基底として，

$$\begin{gathered}\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle|\xi_{n_2}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle|\eta_{m_2}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\\(n_1\leqq n_2\leqq\cdots\leqq n_{N_\mathrm{A}},\ m_1<m_2<\cdots<m_{N_\mathrm{B}})\end{gathered} \tag{11.92}$$

の形のものがとれることがわかる．ここで，$\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}$，$\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}$ は，それぞれ粒子AおよびBに対する対称化，反対称化の演算子である．すなわち，

$$\begin{aligned}&\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_\mathrm{A}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\\&=\frac{1}{\sqrt{N_\mathrm{A}!N_\mathrm{B}!}}\sum_{\sigma\in S_{N_\mathrm{A}}}\sum_{\tau\in S_{N_\mathrm{B}}}\mathrm{sgn}(\tau)|\xi_{n_{\sigma(1)}}\rangle\cdot\\&\qquad\cdot\cdots|\xi_{n_{\sigma(N_\mathrm{A})}}\rangle|\eta_{m_{\tau(1)}}\rangle\cdots|\eta_{m_{\tau(N_\mathrm{B})}}\rangle\end{aligned} \tag{11.93}$$

である．

つぎに，粒子A，Bの生成・消滅演算子 $\hat{a}_n^{(\mathrm{A})\dagger}$，$\hat{a}_n^{(\mathrm{A})}$ および $\hat{a}_m^{(\mathrm{B})\dagger}$，$\hat{a}_m^{(\mathrm{B})}$ を次式で定義しよう．

$$\begin{aligned}&\hat{a}_n^{(\mathrm{A})\dagger}\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{n_\mathrm{B}}\rangle)\\&=\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_n\rangle|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\\&\hat{a}_n^{(\mathrm{A})}\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\\&=\sum_{i=1}^{N_\mathrm{A}}\delta_{n,n_i}\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle\cdots\underset{i}{\wedge}\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\\&\hat{a}_m^{(\mathrm{B})\dagger}\hat{\mathscr{S}}_\mathrm{A}\hat{\mathscr{A}}_\mathrm{B}(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_\mathrm{A}}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_\mathrm{B}}}\rangle)\end{aligned}$$

$$=\hat{\mathscr{S}}_A\hat{\mathscr{A}}_B(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_A}}\rangle|\eta_m\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_B}}\rangle)$$

$$\hat{a}_m^{(B)}\hat{\mathscr{S}}_A\hat{\mathscr{A}}_B(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_A}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots|\eta_{m_{N_B}}\rangle)$$

$$=\sum_{i=1}^{N_B}(-1)^{i-1}\delta_{m,m_i}\hat{\mathscr{S}}_A\hat{\mathscr{A}}_B\cdot$$

$$\cdot(|\xi_{n_1}\rangle\cdots|\xi_{n_{N_A}}\rangle|\eta_{m_1}\rangle\cdots\underset{i}{\wedge}\cdots|\eta_{m_{N_B}}\rangle) \tag{11.94}$$

すなわち，$\hat{a}_n^{(A)}$, $\hat{a}_n^{(A)\dagger}$ は粒子Aの部分にのみ働き，$\hat{a}_m^{(B)}$, $\hat{a}_m^{(B)\dagger}$ は粒子Bに関する部分にのみ働くとするのである．そうすると，Aに関する部分とBに関する部分は完全に独立となり，それぞれの部分で前にみたようなボソンの場合，およびフェルミオンの場合の議論が成り立つ．けっきょく，$\hat{a}_n^{(A)}$, $\hat{a}_n^{(A)\dagger}$ はボソンの交換関係をみたし，$\hat{a}_n^{(B)}$, $\hat{a}_n^{(B)\dagger}$ はフェルミオンの交換関係をみたしているが，Aに関する演算子とBに関する演算子は可換であることになる．

$$[\hat{a}_n^{(A)},\hat{a}_m^{(B)}]=[\hat{a}_n^{(A)},\hat{a}_m^{(B)\dagger}]=[\hat{a}_n^{(A)\dagger},\hat{a}_m^{(B)}]$$
$$=[\hat{a}_n^{(A)\dagger},\hat{a}_m^{(B)\dagger}]=0 \tag{11.95}$$

ここで行った議論は，たくさんの種類の粒子がある場合にもまったく同様であるから，けっきょく，異なる種類の粒子の場はおたがいに可換であるとみなしてよいことがわかった．しかしながら，これは，いわば便宜的なものであり，生成・消滅演算子の定義を変えると，異なる種類の粒子の場がおたがいに反可換であるとしてもよいことがわかる．実際，(11.95)をみたすような $\hat{a}_n^{(A)}$, $\hat{a}_m^{(B)}$ が与えられたとき，

$$\hat{a}_n^{(A)\prime}=\hat{a}_n^{(A)}$$
$$\hat{a}_m^{(B)\prime}=(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}\hat{a}_m^{(B)} \tag{11.96}$$

によって新しい演算子 $\hat{a}_n^{(A)\prime}$, $\hat{a}_m^{(B)\prime}$ およびそのエルミート共役を導入してみよう．ここで $\hat{\mathscr{N}}_A=\sum_n\hat{a}_n^{(A)\dagger}\hat{a}_n^{(A)}$ は粒子Aの数演算子である．$\hat{\mathscr{N}}_A$ は $\hat{a}_m^{(B)}$, $\hat{a}_m^{(B)\dagger}$ と可換であるから，

$$\{\hat{a}_m^{(B)\prime},\ \hat{a}_n^{(B)\prime}\}=(-1)^{2\hat{\mathscr{N}}_A}\{\hat{a}_m^{(B)},\ \hat{a}_n^{(B)}\}=0$$
$$\{\hat{a}_m^{(B)\prime},\ \hat{a}_n^{(B)\prime\dagger}\}=(-1)^{2\hat{\mathscr{N}}_A}\{\hat{a}_m^{(B)},\ \hat{a}_n^{(B)\dagger}\}=\delta_{m,n} \tag{11.97}$$

となり，$\hat{a}_m^{(B)\prime}$, $\hat{a}_m^{(B)\prime\dagger}$ はもとの $\hat{a}_m^{(B)}$, $\hat{a}_m^{(B)\dagger}$ と同じ反交換関係をみたす．ここで，$\hat{\mathscr{N}}_A$ の固有値は整数であるから，$(-1)^{2\hat{\mathscr{N}}_A}$ は恒等的に1に等しいことを使った．

ところが，$\hat{a}_n^{(A)\prime}$ と $\hat{a}_m^{(B)\prime}$ の間の交換関係は，因子 $(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}$ のために変更を受ける．実際，

$$[\hat{a}_n^{(A)},\ \hat{a}_m^{(B)}]=\hat{a}_n^{(A)}\hat{a}_m^{(B)}-\hat{a}_m^{(B)}\hat{a}_n^{(A)}=0 \tag{11.98}$$

に，$\hat{a}_n^{(A)}=\hat{a}_n^{(A)\prime}$，$\hat{a}_m^{(B)}=(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}\hat{a}_m^{(B)\prime}$ を代入すると，

$$\hat{a}_n^{(A)\prime}(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}\hat{a}_m^{(B)\prime}-(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}\hat{a}_m^{(B)\prime}\hat{a}_n^{(A)\prime}=0 \tag{11.99}$$

となるが，$\hat{a}_n^{(A)}(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}=-(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}\hat{a}_n^{(A)}$ に注意すると，(11.99)は，

$$\{\hat{a}_n^{(A)\prime},\ \hat{a}_m^{(B)\prime}\}=0 \tag{11.100}$$

となり，$\hat{a}_n^{(A)\prime}$ と $\hat{a}_m^{(B)\prime}$ が反可換であることがわかる．

けっきょく，異種の粒子の場の演算子は可換であるとしても反可換であるとしてもよいことがわかった．実際，いま考えている場合のように，それぞれの種類の粒子数が保存するときには，異種粒子の場の間の交換関係は，単に便宜上の約束事にすぎず，物理的な意味はない．ところが，相対論的な場合のように，物理的なプロセスで粒子が生成したり消滅したりするときは，異種粒子の場の間の交換関係をうまくとったときに，はじめてハミルトニアンが$(-1)^{\hat{\mathscr{N}}_A}$のような因子を含まない自然な形になることがわかる．実際，相対論的な場の量子論では，ボソンの場どうしは可換，フェルミオンの場どうしは反可換，フェルミオンの場とボソンの場は可換とするのが自然であることがわかっている．

[問題3] D 組のフェルミオンの生成・消滅演算子 $\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n (n=1, 2, \cdots, D)$ を，あるベクトル空間 V 上の演算子であり，反交換関係

$$\{\hat{a}_n, \hat{a}_m\}=0,\ \{\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_m^\dagger\}=0,\ \{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\}=\delta_{n,m}$$

をみたすものとして抽象的に定義してみよう．

(1) $\hat{a}_n|0\rangle=0 \quad (n=1,2,\cdots,D)$ をみたすようなゼロでない V の元 $|0\rangle$が存在することを示せ．

(2) $(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{m_2}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle \quad (m_1, \cdots, m_D=0$ または $1)$ によってはられる部分空間は，$\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ に関して閉じていることを示せ．

(3) $\hat{\mathscr{N}}_n=\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$ とすると，

$$\hat{\mathscr{N}}_n(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle=m_n(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle$$

であることを示せ．

[解] (1) 任意のゼロでない V の元を $|v\rangle$とする．$\hat{a}_1|v\rangle=0$ ならば $|v_1\rangle=|v\rangle$ とし，$\hat{a}_1|v\rangle\neq 0$ ならば $|v_1\rangle=\hat{a}_1|v\rangle$とする．$\hat{a}_1{}^2=0$ に注意すると，いずれにしても，$|v_1\rangle\neq 0$，かつ，$\hat{a}_1|v_1\rangle=0$ であることがわかる．つぎに，$\hat{a}_2|v_1\rangle=0$ ならば $|v_2\rangle=|v_1\rangle$ とし，$\hat{a}_2|v_1\rangle\neq 0$ ならば $|v_2\rangle=\hat{a}_1|v_1\rangle$ とする．$\{\hat{a}_1, \hat{a}_2\}=0$，$\hat{a}_2{}^2=0$ に注意すると，いずれにしても $|v_2\rangle\neq 0$ かつ $\hat{a}_1|v_2\rangle=\hat{a}_2|v_2\rangle=0$ であることがわかる．同様の手続きをくりかえすと，最後に得られるもの $|v_D\rangle$は，$|v_D\rangle\neq 0$，かつ，$\hat{a}_n|v_D\rangle=0 \quad (n=1,2,\cdots,D)$ をみたす．

(2) $|m_1, m_2, \cdots, m_D\rangle=(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle \quad (m_1, m_2, \cdots, m_D=0$ または $1)$ と書こう．反交換関係 $\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger=-\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i^\dagger$ および，$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger=-\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i+\delta_{ij}$を使うと，

$$\hat{a}_n^\dagger|m_1, m_2, \cdots, m_D\rangle$$

$$=(-1)^{\sum_{j=1}^{n-1}m_j}(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}\cdots(\hat{a}_n^\dagger)^{m_n+1}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle$$

$$=\begin{cases}(-1)^{\sum_{j=1}^{n-1}m_j}|m_1,\cdots,\underset{\substack{\uparrow\\ n\text{番目}}}{1},\cdots,m_D\rangle & (m_n=0\text{ のとき})\\ 0 & (m_n=1\text{ のとき})\end{cases}$$

および,

$$\hat{a}_n|m_1,m_2,\cdots,m_D\rangle$$
$$=(-1)^{\sum_{j=1}^{n-1}m_j}(\hat{a}_1^\dagger)^{m_1}\cdots\hat{a}_n(\hat{a}_n^\dagger)^{m_n}\cdots(\hat{a}_D^\dagger)^{m_D}|0\rangle$$

$$=\begin{cases}0 & (m_n=0\text{ のとき})\\ (-1)^{\sum_{j=1}^{n-1}m_j}|m_1,\cdots,\underset{\substack{\uparrow\\ n\text{番目}}}{0},\cdots,m_D\rangle & (m_n=1\text{ のとき})\end{cases}$$

が得られる.

(3) 恒等式 $[AB,C]=A\{B,C\}-\{A,C\}B$ を使うと,

$$[\hat{\mathcal{N}}_n,\hat{a}_m^\dagger]=[\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n,\hat{a}_m^\dagger]=\hat{a}_n^\dagger\{\hat{a}_n,\hat{a}_m^\dagger\}-\{\hat{a}_n^\dagger,\hat{a}_m^\dagger\}\hat{a}_n$$
$$=\delta_{n,m}\hat{a}_m^\dagger$$

であることがわかる. よって $\hat{a}_m^\dagger$ は, $\hat{\mathcal{N}}_m$ の固有値を1だけ増加させる演算子である. $\hat{\mathcal{N}}_n|0\rangle=0$ ($n=1,\ 2,\ \cdots,D$) であるから, $|m_1,m_2,\cdots,m_D\rangle$ の $\hat{\mathcal{N}}_n$ の固有値は m_n である. ∎

第11章　章 末 問 題

[1] 2種類のフェルミオン(uクォークとdクォーク)の生成・消滅演算子を $\hat{u}_n^\dagger$, $\hat{u}_n$ および $\hat{d}_n^\dagger$, $\hat{d}_n$ とし, uクォークの生成・消滅演算子は, dクォークの生成・消滅演算子と反可換であるとする. 全系のハミルトニアンが,

$$\hat{H}=\sum_n\varepsilon_n(\hat{u}_n^\dagger\hat{u}_n+\hat{d}_n^\dagger\hat{d}_n)$$

で与えられるとしたとき, つぎのことを示せ.

(1) クォーク数　$\hat{N}=\sum_n(\hat{u}_n^\dagger\hat{u}_n+\hat{d}_n^\dagger\hat{d}_n)$ および,

アイソスピン　$\hat{I}^a=\sum_n(\hat{u}_n^\dagger,\hat{d}_n^\dagger)\frac{1}{2}\sigma^a\begin{pmatrix}\hat{u}_n\\ \hat{d}_n\end{pmatrix}$　　$(a=1,\ 2,\ 3)$

が保存することを示せ. ここで σ^a は Pauli 行列とする.

(2) 交換関係

$$[\hat{N}, \hat{I}^a]=0$$

$$[\hat{I}^a, \hat{I}^b]=i\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{I}^c$$

を示せ.

(3) $\hat{N}$ および $\hat{I}^a$ は，どのような対称性と結びついた保存量であるか.

［解］　(1) 計算を簡単にするために，$\hat{u}_n$，$\hat{d}_n$ をまとめて $\hat{\psi}_n^\alpha$ ($\alpha=1$，2) と書こう．すなわち，

$$\hat{\psi}_n^1=\hat{u}_n,\quad \hat{\psi}_n^2=\hat{d}_n\ ;\ \hat{\psi}_n^{1\dagger}=\hat{u}_n{}^\dagger,\quad \hat{\psi}_n^{2\dagger}=\hat{d}_n{}^\dagger$$

とする．そうすると，反交換関係は，

$$\{\hat{\psi}_n^\alpha, \hat{\psi}_m^\beta\}=\{\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}, \hat{\psi}_m^{\beta\dagger}\}=0$$

$$\{\hat{\psi}_n^\alpha, \hat{\psi}_m^{\beta\dagger}\}=\delta_{n,m}\delta^{\alpha\beta}$$

と書けて，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha$$

と書ける．また，クォーク数およびアイソスピンの演算子は，

$$\hat{N}=\sum_{n,\alpha}\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha$$

$$\hat{I}^a=\sum_{n,\alpha,\beta}\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a\hat{\psi}_n^\beta$$

と表せる．ここで $\sigma_{\alpha\beta}^a$ は Pauli 行列 σ^a の行列要素である．これらの演算子と，$\hat{\psi}_n^\alpha$，$\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}$ の交換子は簡単な計算により，

$$[\hat{N}, \hat{\psi}_n^\alpha]=-\hat{\psi}_n^\alpha,\quad [\hat{N}, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}]=\hat{\psi}_n{}^{\alpha\dagger} \qquad ⓐ$$

$$[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^\alpha]=-\sum_\beta\frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a\hat{\psi}_n^\beta,$$

$$[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}]=\sum_\beta\hat{\psi}_n^{\beta\dagger}\frac{1}{2}\sigma_{\beta\alpha}^a \qquad ⓑ$$

であることがわかる．これを使うと，

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{H}]&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n[\hat{N}, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha]\\&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n\{[\hat{N}, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}]\hat{\psi}_n^\alpha+\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}[\hat{N}, \hat{\psi}_n^\alpha]\}\\&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n\{\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha-\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha\}=0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\hat{I}^a, \hat{H}]&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\hat{\psi}_n^\alpha]\\&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n\{[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}]\hat{\psi}_n^\alpha+\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^\alpha]\}\\&=\sum_{n,\alpha}\varepsilon_n\left\{\sum_\beta\hat{\psi}_n^{\beta\dagger}\frac{1}{2}\sigma_{\beta\alpha}^a\hat{\psi}_n^\alpha-\sum_\beta\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}\frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a\hat{\psi}_n^\beta\right\}=0\end{aligned}$$

が示される．

(2) ⓐ，ⓑを使うと，つぎのように計算できる．

$$[\hat{N}, \hat{I}^a] = \sum_{n,\alpha,\beta} [\hat{N}, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a \hat{\psi}_n^\beta]$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \left\{ [\hat{N}, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}] \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a \hat{\psi}_n^\beta + \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a [\hat{N}, \hat{\psi}_n^\beta] \right\}$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \left\{ \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a \hat{\psi}_n^\beta - \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^a \hat{\psi}_n^\beta \right\} = 0$$

$$[\hat{I}^a, \hat{I}^b] = \sum_{n,\alpha,\beta} \left[\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^b \hat{\psi}_n^\beta \right]$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \left\{ [\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}] \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^b \hat{\psi}_n^\beta + \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^b [\hat{I}^a, \hat{\psi}_n^\beta] \right\}$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \left\{ \left(\sum_\gamma \hat{\psi}_n^{\gamma\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\gamma\alpha}^a \right) \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^b \hat{\psi}_n^\beta + \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^b \left(-\sum_\gamma \frac{1}{2}\sigma_{\beta\gamma}^a \hat{\psi}_n^\gamma \right) \right\}$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \left(\left[\frac{1}{2}\sigma^a, \ \frac{1}{2}\sigma^b \right] \right)_{\alpha\beta} \hat{\psi}_n^\beta$$

$$= \sum_{n,\alpha,\beta} \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \left(\sum_c i\varepsilon^{abc} \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}^c \right) \hat{\psi}_n^\beta$$

$$= \sum_c i\varepsilon^{abc} \hat{I}^c$$

(3) ⓐは，$\hat{N}$ が変換 $\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} \mapsto e^{i\theta} \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}$，$\hat{\psi}_n^\alpha \mapsto e^{-i\theta} \hat{\psi}_n^\alpha$ の生成子であることを示している．実際，ユニタリー変換 $e^{i\theta\hat{N}}$ によって $\hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}$ および $\hat{\psi}_n^\alpha$ が，

$$e^{i\theta\hat{N}} \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger} e^{-i\theta\hat{N}} = e^{i\theta} \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}$$

$$e^{i\theta\hat{N}} \hat{\psi}_n^\alpha e^{-i\theta\hat{N}} = e^{-i\theta} \hat{\psi}_n^\alpha$$

と変換することは容易にチェックできる(このためには，公式

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!} \underbrace{[A[A \cdots [A,}_{n \text{個}} \ B] \cdots]]$$

に $A = i\theta\hat{N}$，$B = \hat{\psi}_n^{\alpha\dagger}$ を代入してⓐを使えばよい)．すなわち，$\hat{N}$ は u クォークの場と d クォークの場の位相を同時に変える変換を生成している．

$\hat{I}^a$ を角運動量の a 成分とみなし，$\hat{\psi}_n^\alpha$ の添字 α はスピノルの成分であるとみなせば，ⓑは無限小回転によるスピノルの変換にほかならないことがわかる．よって，アイソスピンは，u クォークと d クォークをあたかもスピノルの 2 つの成分のように混ぜる変換であるといえる．

[2]　いくつかの粒子からなる系が，熱浴と接しており，エネルギーおよび粒子をやりとりしているとする．簡単のため，1 種類の粒子のみを考え，熱浴の温度および

その粒子に関する化学ポテンシャルを T, μ とする．統計力学の一般論によると，系が粒子数 N，エネルギー E の状態をとる相対確率は，$\exp\left[-\dfrac{E-\mu N}{kT}\right]$ に比例する．理想化された例として系の1粒子状態のエネルギー準位が ε_i $(i=1, 2, 3, \cdots)$ で与えられており，粒子間の相互作用は無視できるような系を考える．この場合，i 番目の準位につまっている粒子の数の期待値 $\bar{n}_i$ はつぎのように与えられことを示せ．

(i) 粒子がフェルミオンの場合，

$$\bar{n}_i=\frac{1}{\exp\left[\dfrac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]+1} \qquad ①$$

これは **Fermi 分布**とよばれている．

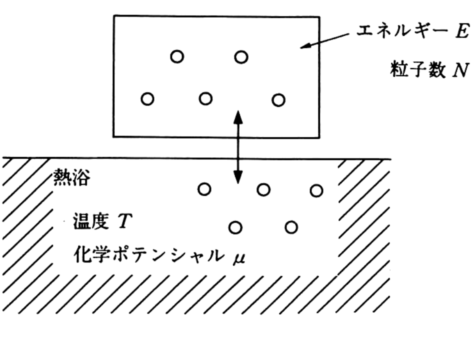
(ii) 粒子がボソンの場合，

$$\bar{n}_i=\frac{1}{\exp\left[\dfrac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]-1} \qquad ②$$

これは **Bose 分布**とよばれている．

［解］ 粒子間の相互作用が無視できるときは，i 番目の準位に n_i 個の粒子がつめられているような状態はエネルギー $E=\sum_i \varepsilon_i n_i$，粒子数 $N=\sum_i n_i$ をもつ．よって，系がそのような状態をとる相対確率は，

$$\exp\left[-\frac{E-\mu N}{kT}\right]=\exp\left[-\frac{1}{kT}\sum_i(\varepsilon_i-\mu)n_i\right]$$



$$=\prod_i \exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n_i\right]$$

となり，各準位における n_i の確率分布は独立であることがわかる．

(1) フェルミオンの場合は $n_i=0$ または1であるから，i 番目の準位に n_i 個の粒子がつまっている絶対確率 $p_i(n_i)$ は，

$$p_i(n_i)=\frac{\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n_i\right]}{1+\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]}$$

であり，n_i の期待値 $\bar{n}_i$ は，

$$\bar{n}_i=\sum_{n_i=0}^{1}n_ip_i(n_i)=\frac{\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]}{1+\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]}=\frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]+1}$$

となる．

(2) ボソンの場合は，$n_i=0$, 1, 2, … であるから，i 番目の準位に n_i 個の粒子がつまっている絶対確率 $p_i(n_i)$ は，

$$p_i(n_i)=\frac{\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n_i\right]}{\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n\right]}$$

であり，n_i の期待値 $\bar{n}_i$ は，

$$\bar{n}_i=\sum_{n_i=0}^{\infty}n_ip_i(n_i)=\frac{\sum_{n=0}^{\infty}n\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n\right]}{\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}n\right]}=\frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}\right]-1} \qquad ⓐ$$

となる．ここで，最後の変形には公式

$$\frac{\sum_{n=0}^{\infty}nx^n}{\sum_{n=0}^{\infty}x^n}=x\frac{\partial}{\partial x}\log\left(\sum_{n=0}^{\infty}x^n\right)=x\frac{\partial}{\partial x}\log\frac{1}{1-x}=\frac{1}{\frac{1}{x}-1}$$

を用いた．

Bose 分布②の形をみると，$\varepsilon_i<\mu$ では $\bar{n}_i$ は負になってしまうようにみえるが，これはⓐの左辺の級数が発散しているからであり，$\varepsilon_i<\mu$ のような準位には無限個の粒子がつまっていることを意味している．しかしながら，実際の系では相互作用が完全にゼロであることはないから，粒子数密度が非常に大きくなると相互作用は無視できなくなり，最初の仮定が破綻してしまうことに注意し

よう.

[3] Wickの定理

$\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ を生成・消滅演算子とし, $\sum_n (x_n\hat{a}_n + y_n\hat{a}_n^\dagger)$ (x_n, y_n は複素数)のように, 生成・消滅演算子の線型結合であるような演算子 $\hat{O}_1$, $\hat{O}_2$, … を考える. $\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle$ は N が奇数のときはもちろんゼロであるが, N が偶数のときはつぎのように与えられることを示せ.

(i) $\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ がボソンの生成・消滅演算子のとき,

$$\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle = \sum_{\substack{\{(i_1,\ j_1),\ \cdots,\ (i_{\frac{N}{2}},\ j_{\frac{N}{2}})\} \\ \text{は}(1,\ 2,\ \cdots,\ N)\text{の対への分解}}} \langle 0|\hat{O}_{i_1}\hat{O}_{j_1}|0\rangle\langle 0|\hat{O}_{i_2}\hat{O}_{j_2}|0\rangle\cdots\langle 0|\hat{O}_{i_{\frac{N}{2}}}\hat{O}_{j_{\frac{N}{2}}}|0\rangle \quad ①$$

(ii) $\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ がフェルミオンの生成・消滅演算子のとき,

$$\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle = \sum_{\substack{\{(i_1,\ j_1),\ \cdots,\ (i_{\frac{N}{2}},\ j_{\frac{N}{2}})\} \\ \text{は}(1,\ 2,\ \cdots,\ N)\text{の対への分解}}} \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N-1 & N \\ i_1 & j_1 & \cdots & i_{\frac{N}{2}} & j_{\frac{N}{2}} \end{pmatrix}.$$

$$\cdot\langle 0|\hat{O}_{i_1}\hat{O}_{j_1}|0\rangle\cdot\langle 0|\hat{O}_{i_2}\hat{O}_{j_2}|0\rangle\cdots\langle 0|\hat{O}_{i_{\frac{N}{2}}}\hat{O}_{j_{\frac{N}{2}}}|0\rangle \quad ②$$

ここで, $\{(i_1,\ j_1),\ \cdots,\ (i_{\frac{N}{2}},\ j_{\frac{N}{2}})\}$ が $(1,\ 2,\ \cdots N)$ の対への分解であるとは, N 個のものからなる列 $(1, 2, \cdots, N)$ を $\frac{N}{2}$ 組の対に分解したものが $(i_1, j_1), \cdots, (i_{\frac{N}{2}},\ j_{\frac{N}{2}})$ であることを意味している. ここで各対 (i_k, j_k) における順序は, もとの列に現れる順序と同じであるとする. また, $\frac{N}{2}$ 組の対の並べ方は問題にしないとする. よって, 右辺の総和は,

$$i_1 < j_1,\ i_2 < j_2,\ \cdots,\ i_{\frac{N}{2}} < j_{\frac{N}{2}}$$

$$i_1 < i_2 < \cdots < i_{\frac{N}{2}}$$

$$\{i_1,\ j_1,\ i_2,\ j_2,\ \cdots,\ i_{\frac{N}{2}},\ j_{\frac{N}{2}}\} = \{1,\ 2,\ \cdots,\ N\}$$

をみたすような i_1, j_1, …, $i_{\frac{N}{2}}$, $j_{\frac{N}{2}}$ についての和としてよい. また, 記号 $\mathrm{sgn}\sigma$ は置換 σ が偶置換なら1, 奇置換なら-1を意味するものとする.

[解] フェルミオンの場合に対しての証明を示そう. ボソンの場合は, 符号に注意する必要がないのでもっと簡単である. 証明は数学的帰納法による. $N=2$ の場合は自明である. N が $2k$ 以下のときは示されているとし, $N=2k+2$ のときを

考えよう．証明すべき式の両辺は $\hat{O}_1$ に関して線型であるから，$\hat{O}_1=\hat{a}_n^\dagger$ の場合と $\hat{O}_1=\hat{a}_n$ の場合に示せればよい．$\hat{O}_1=\hat{a}_n^\dagger$ のときは，$\langle 0|\hat{O}_1=\langle 0|\hat{a}_n^\dagger=(\hat{a}_n|0\rangle)^\dagger=0$ より，左辺も右辺もともにゼロであり確かに等しい．よって $\hat{O}_1=\hat{a}_n$ の場合だけを考えればよい．このとき，

$$
\begin{aligned}
&\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle=\{\hat{O}_1,\hat{O}_2\}\hat{O}_3\cdots\hat{O}_N|0\rangle-\hat{O}_2\hat{O}_1\hat{O}_3\cdots\hat{O}_N|0\rangle\\
&\quad=\{\hat{O}_1,\hat{O}_2\}\hat{O}_3\cdots\hat{O}_N|0\rangle-\hat{O}_2\{\hat{O}_1,\hat{O}_3\}\hat{O}_4\cdots\hat{O}_N|0\rangle\\
&\qquad+\hat{O}_2\hat{O}_3\hat{O}_1\hat{O}_4\cdots\hat{O}_N|0\rangle\\
&\quad=\cdots\cdots
\end{aligned}
$$

のようにして，$\hat{O}_1$ をどんどん右のほうへ動かしていくと，最後に $\cdots\hat{O}_1|0\rangle$ となるが，$\hat{O}_1=\hat{a}_n$ ならばこれはゼロである．また，$\{\hat{O}_i,\hat{O}_j\}$ はc数であるから，けっきょく

$$
\begin{aligned}
&\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle\\
&=\{\hat{O}_1,\hat{O}_2\}\langle 0|\hat{O}_3\hat{O}_4\cdots\hat{O}_N|0\rangle-\{\hat{O}_1,\hat{O}_3\}\langle 0|\hat{O}_2\hat{O}_4\cdots\hat{O}_N|0\rangle+\cdots\\
&=\sum_{k=2}^{N}(-1)^k\{\hat{O}_1,\hat{O}_k\}\langle 0|\underbrace{\hat{O}_2\hat{O}_3\cdots\hat{O}_N}_{k\text{を除く}}|0\rangle
\end{aligned}
$$

が得られる．ところが，$\hat{O}_1=\hat{a}_n$ の場合は，$\hat{O}_1|0\rangle=0$ に注意すると，

$$
\begin{aligned}
&\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_k|0\rangle=\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_k|0\rangle+\langle 0|\hat{O}_k\hat{O}_1|0\rangle\\
&=\langle 0|\{\hat{O}_1,\hat{O}_k\}|0\rangle=\{\hat{O}_1,\hat{O}_k\}\langle 0|0\rangle=\{\hat{O}_1,\hat{O}_k\}
\end{aligned}
$$

であるから，上式は，

$$
\begin{aligned}
&\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_N|0\rangle\\
&=\sum_{k=2}^{N}(-1)^k\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_k|0\rangle\langle 0|\underbrace{\hat{O}_2\hat{O}_3\cdots\hat{O}_N}_{k\text{を除く}}|0\rangle
\end{aligned}
\qquad ⓐ
$$

となる．

一方，証明すべき式②の右辺に現れる対への分解を，$\hat{O}_1$ と対を組むものが $\hat{O}_2$ の場合，$\hat{O}_3$ の場合，…について分けて考えると，

$$
②\text{の右辺}=\sum_{k=2}^{N}(-1)^k\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_k|0\rangle\sum_{\substack{\{(i_2,j_2),\cdots,(i_{\frac{N}{2}},j_{\frac{N}{2}})\}\text{は}\\(2,3,\cdots,N)\text{の対への分解}\\(k\text{を除く})}}\operatorname{sgn}\begin{pmatrix}2\,3\cdots N\ (k\text{を除く})\\ i_2\,j_2\cdots j_{\frac{N}{2}}\end{pmatrix}\cdot
$$

$$\cdot\langle 0|\hat{O}_{i_2}\hat{O}_{j_2}|0\rangle\cdots\langle 0|\hat{O}_{i_{\frac{N}{2}}}\hat{O}_{j_{\frac{N}{2}}}|0\rangle$$
$$=\sum_{k=2}^{N}(-1)^k\langle 0|\hat{O}_1\hat{O}_k|0\rangle\cdot\langle 0|\hat{O}_2\hat{O}_3\cdots\underset{k\text{を除く}}{\wedge}\cdots\hat{O}_N|0\rangle$$

であることがわかる．ここで，最後の変形には帰納法の仮定を用いた．これは⒜の右辺に等しいから，けっきょく②が示されたことになる．

［4］　調和振動子 $\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\dfrac{1}{2}\right)$ が $\hbar\omega$ に比べて十分高いエネルギーをもつときは，系は古典力学によって記述され，$\hat{a}$ や $\hat{a}^\dagger$ はc数のようにふるまうことはよく知られている．そこで，ボソンの生成・消滅演算子 $\hat{a}_i$，$\hat{a}_i^\dagger(i=1, 2, \cdots)$ は調和振動子と同じ交換関係をみたし，各準位にある粒子の数 $\hat{N}_i=\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$ は，調和振動子の場合のハミルトニアンのような形をしていることに注意しよう．そうすると，各準位にある粒子の数が1に比べて十分に大きいときは，生成・消滅演算子をc数として扱ってよいことがわかるだろう．簡単のため，2つの準位のみを考え，ハミルトニアンとして，

$$\hat{H}=\varepsilon_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\varepsilon_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+\lambda(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2) \qquad ①$$

をとる．ここで，右辺の第3項は，1の状態から2の状態への遷移，あるいはその逆の遷移を表している．簡単のため，λ は正の実数とする．

(1) $\hat{a}_1$，$\hat{a}_2$ に対する Heisenberg 方程式を書け．

(2) $\hat{N}_1=\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1$，$\hat{N}_2=\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2$ がともに1に比べて十分大きくて，$\hat{a}_1$，$\hat{a}_2$ をc数とみなしてよいとき，

$$a_1=\sqrt{N_1}e^{i\theta_1},\quad a_2=\sqrt{N_2}e^{i\theta_2}$$

と書こう．N_1，N_2，θ_1，θ_2 の時間発展の式を書け．

(3) 状態1から状態2へ単位時間に流れる粒子数はどれだけか．N_1，N_2，および位相差 $\Delta\theta=\theta_2-\theta_1$ で表せ．

(4) 2つの状態の位相差 $\Delta\theta$ は，時間とともにどのように変化するか．

［解］　(1)

$$\dot{\hat{a}}_1=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}_1]=-i\frac{\varepsilon_1}{\hbar}\hat{a}_1-i\frac{\lambda}{\hbar}\hat{a}_2$$

$$\dot{\hat{a}}_2=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}_2]=-i\frac{\varepsilon_2}{\hbar}\hat{a}_2-i\frac{\lambda}{\hbar}\hat{a}_1$$

(2) $\hat{a}_1$，$\hat{a}_2$ をc数とみなすと上式は，

$$\dot{a}_1=-i\frac{\varepsilon_1}{\hbar}a_1-i\frac{\lambda}{\hbar}a_2 \qquad ⓐ$$

$$\dot{a}_2=-i\frac{\varepsilon_2}{\hbar}a_2-i\frac{\lambda}{\hbar}a_1 \qquad ⓑ$$

となる．これに，$a_1=\sqrt{N_1}e^{i\theta_1}$，$a_2=\sqrt{N_2}e^{i\theta_2}$ を代入して，ⓐの両辺は $e^{i\theta_1}$ で，ⓑの両辺は $e^{i\theta_2}$ でわったのちに実部と虚部に分けると，

$$\dot{N}_1=2\frac{\lambda}{\hbar}\sqrt{N_1N_2}\sin(\theta_2-\theta_1)$$

$$\dot{\theta}_1=-\frac{\varepsilon_1}{\hbar}-\frac{\lambda}{\hbar}\sqrt{\frac{N_2}{N_1}}\cos(\theta_2-\theta_1)$$

$$\dot{N}_2=2\frac{\lambda}{\hbar}\sqrt{N_1N_2}\sin(\theta_1-\theta_2)$$

$$\dot{\theta}_2=-\frac{\varepsilon_2}{\hbar}-\frac{\lambda}{\hbar}\sqrt{\frac{N_1}{N_2}}\cos(\theta_2-\theta_1)$$

が得られる．当然ながら全粒子数 N_1+N_2 は保存している．

(3) 単位時間に，状態1から状態2へ遷移する粒子の数 J は，

$$J=\dot{N}_2=-\dot{N}_1=-\frac{2\lambda}{\hbar}\sqrt{N_1N_2}\sin(\varDelta\theta)$$

である．

(4) $\varDelta\theta$ の時間発展は，

$$\begin{aligned}\varDelta\dot{\theta}&=\dot{\theta}_2-\dot{\theta}_1\\&=\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2}{\hbar}-\frac{\lambda}{\hbar}\cdot\frac{N_1-N_2}{\sqrt{N_1N_2}}\cos(\varDelta\theta)\end{aligned}$$

で与えられる．

[5] 前問の応用として，Josephson 効果とよばれているものを考えよう．通常，超伝導電流は，Cooper 対によって運ばれる電流として理解される．ここで，Cooper 対とは物質中でフォノンその他の相互作用によって，2つの電子が束縛されてできたボソンであり電荷 $2e$ をもつ．薄い絶縁体を超伝導体でサンドイッチ状にはさんだものを Josephson 接合とよんでいる．前問で考えた2つの準位を絶縁体の両側における Cooper 対の準位とみなそう．このとき λ は絶縁体の一方から他方へ Cooper 対がトンネルする大きさを表している．また，Cooper 対は，超伝導体の他の部分から自由に流れ込んできて，常に，$N_1=N_2=N$（時間によらない定数）となっているとしよう（次ページ図参照）．両側の超伝導体の間の電位差を V とすると，Cooper 対は電荷 $2e$ をもつから $\varepsilon_2-\varepsilon_1=2eV$ となることに注意して以下に答えよ．

(1) $V=0$ のとき，絶縁体の一方から他方へどのような電流が流れるか．その電流の最大値 I_C はいくらか．

(2) $V\neq0$ のときは，電流が時間とともに変化することを示せ．

[解] (1) $V=0$ のときは $\varepsilon_1=\varepsilon_2$ であるから，前問の(3)の結果を使うと，トンネル電

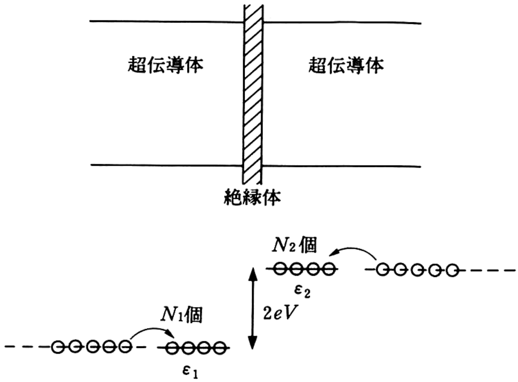


図 Josephson 接合と Cooper 対の一体のエネルギー準位
他の部分との間で Cooper 対は自由に出入りしており，常に $N_1=N_2=N$（一定）に保たれているとする．

流 I は，

$$I=2eJ=-\frac{4e\lambda}{\hbar}N\sin(\varDelta\theta) \qquad ⓐ$$

となる．この場合は，前問の(4)の結果をみると，$\varDelta\dot{\theta}=0$ だから，電流は時間によらず一定である．ⓐで与えられる電流の大きさには上限があることに注意しよう．実際，$\varDelta\theta$ が $\pm\frac{\pi}{2}$ のときに $|I|$ の大きさは最大値 $I_c=\frac{4e\lambda}{\hbar}$ となる．これ以上の電流をエネルギーの損失がないように流すことは不可能である．

(2) $\varepsilon_2-\varepsilon_1=2eV\neq 0$ のときは，前問の(4)の結果より，位相差は，$\varDelta\dot{\theta}=-\frac{2eV}{\hbar}$，すなわち $\varDelta\theta=-\frac{2eV}{\hbar}t+\text{const.}$ となる．よって，トンネル電流 I は，

$$I=-\frac{4e\lambda}{\hbar}N\sin(\varDelta\theta)=\frac{4e\lambda}{\hbar}N\sin\left(\frac{2eV}{\hbar}t+\text{const.}\right)$$

のように時間とともに I_c と $-I_c$ の間を振動する．その角振動数 ω は，$\omega=\frac{2eV}{\hbar}$ で与えられる．

第12章 散 乱 問 題

原子，原子核，素粒子などのミクロの世界の構造を調べたり，そこでの相互作用の力の法則を調べたりするのに，散乱の方法は大変重要な役割をはたす．すなわち，ミクロの対象に入射粒子をぶつけてその行方を追跡する．量子力学では，入射波束が標的粒子と相互作用したあと，どのように時間発展していくかを調べたい．しかし実際には，時間発展をみるかわりに散乱を定常状態として扱うのが便利である．そのため，確率の流れを入射波束と散乱波束に適用して断面積という概念を導入して，確率的に実験と比較する．まず，満足すべき境界条件の下で Schrödinger 方程式を解いて，散乱振幅を求めるために積分方程式の方法を用い(12.3 節)，Born 近似で散乱問題を解く(12.4 節)．つぎに，低エネルギーの散乱における有力な手段として，(運動の恒量である)角運動量の固有状態に分解する部分波展開の方法を扱い，位相のずれという概念を学ぶ(12.5, 12.6節)．また，量子力学の基本的問題の1つである粒子の同等性が重要な役割をはたす同種粒子の散乱をも議論する(12.8節)．最後に，まとめとして，散乱問題の記号的解法である Lippmann-Schwinger の方法を紹介する(12.9 節)．

12.1 散 乱 断 面 積

散乱を現実的に記述するために，図 12.1 のように標的に向かって近づいていく入射波束を考えよう．この入射波束は，実験中にあまり広がってしまわないように，適当な広がりをもたせることにする．入射波束は，標的と相互作用したあと，そのまま進む透過波束に加えて，球面波の散乱波束として外側に向かって進む．そこで，標的粒子との相互作用の影響のもとに，波束が時間 t とともにどのように発展していくかを調べなければならない．

しかし，計算を簡単にするためには，波束の時間発展をみるかわりに，散乱の状態を定常状態として扱ったほうが便利であろう．いま，1 個の粒子とポテンシャルからなる系を∞個用意して，それを同じ場所に重ねてみる．このようにすると，多数の粒子からなる一様な定常流が入射し，標的粒子との相互作用のあと，原点から多方向に向かう散乱粒子の定常流がみえるであろう（もちろん，この定常的な流れを構成する粒子は独立にふるまう）．われわれが求めたいのは，入射流のなかで散乱されるものの割合であるから，このような定常流を考えるだけでもすむ（もちろん，何か，あいまいな点が生じた場合には，きちんと波束をつくって 1 粒子の問題として考えなおす必要がある）．

その前に，つぎのような仮定を導入しておく．

(i) しばらく，簡単のため，入射粒子，標的粒子ともにスピンはゼロとする．

(ii) 入射波束の広がりは，標的を構成している粒子間の距離に比べて小さいとする．したがって，2 個の粒子の散乱を取り出すことができるとする．

ミクロな粒子では，粒子ひとつひとつのゆくえを追跡するかわりに，微分断面積という考え方を適用して確率的に実験と比較すると便利である．

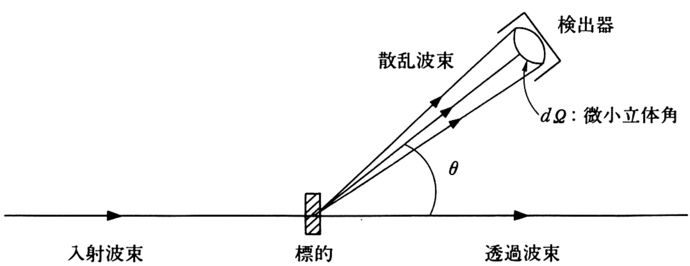


図 12.1

微分断面積の定義

いま，等速度粒子のビームを用意し，それを与えられた標的にあててみよう（図12.1）．そして，入射方向と垂直な平面の単位面積（1 cm²）に単位時間（1 sec）に入射する粒子の数がいくつかを考える．

単位時間に，微小立体角 $d\Omega$ に散乱される粒子の数を dN とすると，散乱された粒子のフラックス[1] j_{sc} を使って，

$$dN=j_{\mathrm{sc}}r^2d\Omega \tag{12.1}$$

となる．dN は入射粒子のフラックス j_{inc}，$d\Omega$ に比例しているので，

$$dN=j_{\mathrm{inc}}\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \tag{12.2}$$

と書いたときの係数 $d\sigma/d\Omega$ のことを，(θ,φ) 方向への**微分断面積**とよぶ．明らかに，

$$\begin{aligned}d\sigma&\equiv\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega=\frac{j_{\mathrm{sc}}r^2d\Omega}{j_{\mathrm{inc}}}\\&=\frac{\text{単位時間に }d\Omega\text{ 内に散乱される粒子の数}}{\text{単位時間に単位面積に入射する粒子の数}}\end{aligned} \tag{12.3}$$

である．

***dσ* の物理的意味**

(12.2) で次元を勘定すると，$[dN]=[T]^{-1}$，$[j_{\mathrm{inc}}]=[T]^{-1}[L]^{-2}$ なので，$[d\sigma]=[L]^2$ の次元，すなわち，面積の次元をもつ．さらに，(12.2) は面積 $d\sigma$ に 1 秒間に入射する粒子の数が 1 秒間に $d\Omega$ 内に散乱されて検出器で検出される数に等しいということを意味しているので，実際，以下のように $d\sigma$ を面積と解釈することができる．

> 入射粒子が $d\Omega$ へ散乱される確率は，入射粒子流に垂直な仮想的な面積 $d\sigma$ を考え，粒子がそれにあたったときに $d\Omega$ への散乱が起きるとみなすことによって得られる．

このように，散乱が起きる確率を記述する量は，面積の次元をもっていることに注意しよう．

全断面積

単位時間に散乱される粒子の総数を得るためには，全角度について積分すればよい．つまり，

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \tag{12.4a}$$

入射方向を z 軸とする極座標 θ, φ を用いて，散乱方向を表せば，$d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$ な

1） 単位時間に単位面積を通過する粒子の数をフラックスという．

ので,

$$\sigma_{\text{tot}}=2\pi\int_0^{\pi}\frac{d\sigma}{d\Omega}\sin\theta d\theta \tag{12.4b}$$

となる. 核物理学では, 標的の大きさが 10^{-13} cm から 10^{-12} cm 程度であるので, 断面積を,

1 バーン=1 barn=10^{-24} cm^2

1 ミリ・バーン=1 mb=10^{-27} cm^2

で測ることが多い. さらに小さなミクロの世界を調べるときは, 必要に応じてつぎの単位を用いる.

1 マイクロ・バーン=1 μb=10^{-30} cm^2

1 ナノ・バーン=1 nb=10^{-33} cm^2

1 ピコ・バーン=1 pb=10^{-36} cm^2

1 フェント・バーン=1 fb=10^{-39} cm^2

これまでのところ, 暗黙のうちに仮定しているのは, 起こりうる散乱が弾性散乱だけであるということである. さらにまた, 原子や核のような散乱体を複雑な形で取り扱うかわりに, $\boldsymbol{r}$ によって決まる静的なポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ によって, それらを表すことにしよう.

12.2 散乱断面積の計算

いま, 質量 m の粒子のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ による散乱を考えよう. そのような散乱を量子力学で記述するためには, 前述したように, 散乱中心に近づいていく波束を考え, その波束が時間を含む Schrödinger 方程式に従ってどのように時間発展していくかをみて計算し, 実験と比較する必要がある. しかし, この方法は複雑で, とても難しい問題なので, 12.1 節で述べたように, 散乱状態を定常状態として扱うことにしよう.

定まったエネルギーをもつ定常状態を,

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\varphi(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{12.5}$$

で表し, これを Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{12.6}$$

に代入する. ただし, μ は換算質量である. したがって, 解くべき方程式は,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{12.7}$$

となる．ただし，$r\to\infty$ で $V(\boldsymbol{r})$ は $1/r$ よりは速くゼロになるものとし，Coulomb ポテンシャルによる散乱はあとで特別にとりあつかう．

定常的散乱状態の漸近形 — 境界条件

さて，Schrödinger 方程式(12.7)を解くためには，境界条件を設定しなければならない．つまり，物理的な状況に合うように $\varphi(\boldsymbol{r})$ の $r\to$大におけるふるまいを指定する必要がある．$r\to\infty$ のとき，$V(\boldsymbol{r})\to 0$ となる場合を考えているので，$r\to$大での $\varphi(\boldsymbol{r})$ の形は自由粒子の場合の方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\varphi=E\varphi \tag{12.8}$$

をみたす必要があるので，

$$(\Delta+k^2)\varphi=0 \tag{12.9}$$

をみたすように境界条件を設定しよう．

まず，入射波が負の z 軸方向から原点に向かって進むとしよう(図12.1)．入射粒子の運動量は $\hbar k$，エネルギーは $\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu}$ であるから，(12.9)の解は平面波で，

$$\varphi_{\mathrm{inc}}=e^{ikz} \tag{12.10}$$

となる．

この入射波が標的のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ と相互作用をすると，外向きの散乱波 φ_{sc} が出始める．もしも散乱が等方的だとすると，φ_{sc} は e^{ikr}/r の形をとるであろう[1]．これが(12.9)の解となる．しかしながら，実際には，散乱波は等方的ではなく，一般的には，

$$\varphi_{\mathrm{sc}}=f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{12.11}$$

と書ける．この $f(\theta,\varphi)$ のことを**散乱振幅**とよぶ．

今後，簡単のため，$V(\boldsymbol{r})$ を中心力ポテンシャル $V(r)$ とし，$f(\theta,\varphi)$ を $f(\theta)$ とすると，

r が十分大きいところでは，

$$(\Delta+k^2)\varphi_{\mathrm{sc}}=0 \tag{12.12}$$

が成り立っていることを容易に示すことができる．

例題 (12.12)を証明せよ．

解 r が大きいとき，

---

1) $\exp\left(-\dfrac{iEt}{\hbar}\right)$ より，外向きの散乱波であることがわかる．

$$(\Delta+k^2)\left[f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]=0 \qquad ⓐ$$

を示せばよい．極座標でのラプラシアンΔ(5.9)を用いて，

$$\begin{aligned}\Delta\left[f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]&=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[f(\theta)e^{ikr}]\\&\quad+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\left[f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]\\&=-k^2f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}+\frac{e^{ikr}}{r^3}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\right]\end{aligned} \qquad ⓑ$$

右辺第2項はrが大きいとき第1項に対して省略できるので，ⓐが成り立つ． ∎

したがって，z軸の負の方向から平面波が入射しているような状況に対応する境界条件は，

$$\varphi(\boldsymbol{r})=e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (r\to\infty) \tag{12.13}$$

の形をとる．物理的に考えれば明らかなように，Schrödinger 方程式(12.7)をみたし，無限遠でのふるまいが(12.13)の形をとる解はただ1個存在する．以下で議論するように，ここで現れる$f(\theta)$は微分断面積σに結びついている．

散乱が起これば，その分だけ散乱中心の後方($z>0$)における振幅は減衰するはずだと思われるから，境界条件(12.13)において，$z>0$でもe^{ikz}のままであることに疑問をもつ人がいるかもしれない．しかし，実は，この形がうまく物理的状況を表していることを**確率の流れ**を計算することによって示すことにしよう．

確率の流れを用いての断面積の計算

Schrödinger 方程式が(12.13)の境界条件のもとで解けたとしよう．これから断面積を求めるには，どうしたらよいであろうか．それには，**確率の流れ**

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})&=\frac{\hbar}{2\mu i}[\varphi^*(\boldsymbol{r})\nabla\varphi(\boldsymbol{r})-\nabla\varphi^*(\boldsymbol{r})\cdot\varphi(\boldsymbol{r})]\\&=\frac{1}{\mu}\mathrm{Re}\left[\varphi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi(\boldsymbol{r})\right]\end{aligned} \tag{12.14}$$

を求めればよい．いま，$\varphi(\boldsymbol{r})$の漸近形(12.13)を上式に代入し，遠方における流れの形を調べてみよう．図12.2のように，空間の各点ごとに単位ベクトル$\boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_\theta$, $\boldsymbol{e}_\varphi$を基底ベクトルとする座標系を設ける．∇を極座標の微分で表しておくと，

$$\nabla=\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{12.15}$$

となるので，(12.13)の$\varphi(\boldsymbol{r})$に作用させると，

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi(\boldsymbol{r})=\hbar k\left[\boldsymbol{e}_ze^{ikz}+\boldsymbol{e}_rf(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}+O\left(\frac{1}{r^2}\right)\right] \tag{12.16}$$

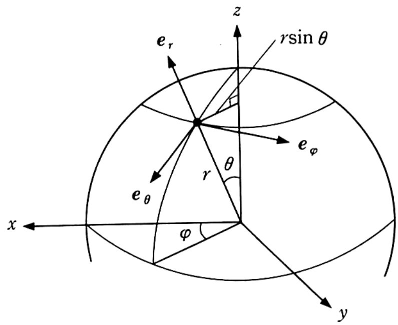


図 12.2

ただし，$\boldsymbol{e}_\theta\cdots$，$\boldsymbol{e}_\varphi\cdots$の項は$O(1/r^2)$に含まれている．これを(12.13)の複素共役とともに(12.14)に代入すると，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{\hbar k}{\mu}\left[\boldsymbol{e}_z+\boldsymbol{e}_r|f(\theta)|^2\frac{1}{r^2} + (\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_z)\mathrm{Re}\left\{f(\theta)\frac{e^{ik(r-z)}}{r}\right\}+\cdots\right] \tag{12.17}$$

を得る．

まず，(12.17)の右辺第 1 項の意味を考えよう．$j_z=j_{\mathrm{inc}}=\hbar k/\mu=v$ なので，この項はフラックス v の入射ビームと解釈される．すなわち，進行方向に垂直な面の単位面積を単位時間に通過する粒子数を与える．つぎに第 2 項は，j_{sc} の動径方向への外向きの流れ

$$j_{\mathrm{sc},r}=\frac{\hbar k}{\mu}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \tag{12.18}$$

であるから，これが散乱された粒子の流れに対応する．微小立体角 $d\Omega$ のなかに(図 12.1)単位時間に散乱される粒子数 dN は，

$$dN=j_{\mathrm{sc},r}r^2d\Omega=\frac{\hbar k}{\mu}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}r^2d\Omega=v|f(\theta)|^2d\Omega \tag{12.19}$$

一方，これは(12.2)の右辺 $j_{\mathrm{inc}}\,d\sigma$ に等しいから，

$$d\sigma=|f(\theta)|^2d\Omega \tag{12.20}$$

となり，微分断面積 $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$ が $|f(\theta)|^2$ で与えられることがわかった．したがって，微分断面積を求める問題は散乱振幅 $f(\theta)$ を求めることに帰着する．

入射波と散乱波の干渉

前述したように，(12.13)をみると，入射波は散乱中心の後方 $z>0$ でも e^{ikz} になっている．散乱が起これば，その分だけ入射波の $z>0$ での強さは減衰するはずである．はたして，そうなっているかどうかを確かめよう．そのために，図 12.1 で原点を中心とする大きな球面を考え，この球面に流れこむ粒子数と球面から流れ出る粒子数が釣り合っているかどうかを調べてみる．

(12.17)の第 1 項は，いたるところ一様な z 方向の流れなので，差し引きゼロである．第 2 項は動径方向に外向きの流れで(12.19)で与えられているので，全立体角で積分すると，

$$v\int|f(\theta)|^2 d\Omega = v\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = v\sigma_{\mathrm{tot}} \tag{12.21}$$

が単位時間に球面から外に流れ出す粒子数である．そこで，粒子数の保存が成立するためには，(12.17)の第 3 項が，これを打ち消していなければならない．

第 3 項の球面上での積分は，$\boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_r=\cos\theta$ を用いて，

$$v\mathrm{Re}\int f(\theta)(1+\cos\theta)\frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r}r^2 d\Omega \tag{12.22}$$

ゆえに，$d\Omega=d(\cos\theta)d\varphi$ を代入して部分積分すると，

$$\begin{aligned}(12.22)=v\cdot 2\pi r\mathrm{Re}\biggl\{&-\frac{1}{ikr}\Bigl[f(\theta)(1+\cos\theta)e^{ikr(1-\cos\theta)}\Bigr]_{-1}^{1}\\&+\frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[f(\theta)(1+\cos\theta)\right]e^{ikr(1-\cos\theta)}\biggr\}\end{aligned}$$

右辺第 2 項の積分は，$\cos\theta=1$ 以外のところでは，θ の微小な変動に対して激しく振動する．そこで，$\theta=0$ の近傍のみが積分に寄与し，積分項は $O(1/ikr)$ でゼロに近づく．したがって右辺第 2 項を無視すると，

$$\begin{aligned}(12.22)&=v\cdot 2\pi r\left[-\frac{2}{kr}\mathrm{Im}f(0)\right]\\&=-v\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0)\end{aligned} \tag{12.23}$$

となり，これが(12.21)を打ち消すためには，

$$v\sigma_{\mathrm{tot}}-v\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0)=0$$

$$\therefore\quad \mathrm{Im}f(0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{tot}} \tag{12.24}$$

が成り立っていなければならない．Schrödinger 方程式を正しく解いて得た散乱振幅 $f(\theta)$ は，当然これをみたしているはずで，(12.24)を**光学定理**とよぶ(後述)．い

ままでの説明から明らかなように，光学定理は確率の保存の反映を意味している．

(12.17)の第3項は入射波と散乱波の干渉を表し，入射波を x，y 方向に有限な広がりをもつ波束とすると，入射波と散乱波が重なるのは $\theta=0$ および π 付近である．$\theta=\pi$ 付近の寄与は $\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_z=0$ のためゼロとなり，$\theta=0$ 付近の寄与のみが存在する．したがって直観的な物理的意味は，$\theta=0$ 付近に $-v\sigma_{\mathrm{tot}}\boldsymbol{e}_z$ の流れがあることを意味している．ゆえに，入射粒子の流れから，単位時間に $v\sigma_{\mathrm{tot}}$ 個の粒子が取り去られ，散乱による減衰が確かめられた．このようにして，(12.13)の境界条件を用いるときの心配は解消される．

12.3　散乱状態の波動関数に対する積分方程式

z 軸の負の方向から平面波が入射し，原点にある標的との相互作用のもとに，散乱波が球面波として外側に向かって進む(図12.1)という状況に対応する境界条件(12.13)は満足すべき性質を備えていることがわかった．そこで，この(12.13)をみたすようにSchrödinger方程式(12.7)を解いて，散乱振幅 $f(\theta)$ を求めてみよう．(12.7)の両辺に $-2\mu/\hbar^2$ をかけると，$V(\boldsymbol{r})=V(r)$ を用いて

$$(\Delta+k^2)\varphi(\boldsymbol{r})=U(r)\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{12.25}$$

ここで，$k^2=\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$，$U(r)=\dfrac{2\mu V(r)}{\hbar^2}$ である．

微分方程式(12.25)を解くために，

$$(\Delta+k^2)G(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r}) \tag{12.26}$$

をみたす，いわゆるGreen関数 $G(\boldsymbol{r})$ を導入しよう．(12.25)を境界条件(12.13)の下に解くことは，つぎの積分方程式

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\varphi_0(\boldsymbol{r})+\int d^3r'\,G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')\varphi(\boldsymbol{r}') \tag{12.27}$$

を解くことに帰着する．ただし，$\varphi_0(\boldsymbol{r})$ は $(\Delta+k^2)\varphi_0(\boldsymbol{r})=0$ をみたす平面波 e^{ikz} である．

例題　(12.27)を証明せよ．

解　(12.27)の両辺に左から $(\Delta+k^2)$ を作用させると，

$$\begin{aligned}(\Delta+k^2)\varphi(\boldsymbol{r})&=(\Delta+k^2)\varphi_0(\boldsymbol{r})+\int d^3r'(\Delta+k^2)G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')\varphi(\boldsymbol{r}')\\&=\int d^3r'\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')\varphi(\boldsymbol{r}')\\&=U(r)\varphi(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

となるので明らか．　▮

積分方程式を使う利点は，$\varphi_0(\boldsymbol{r})$，$G(\boldsymbol{r})$ を正しく選ぶことにより，(12.13)の望ましい漸近形をみたす解を得られる点にある．すなわち，(12.27)は Schrödinger 方程式(12.7)と境界条件(12.13)の両方をみたす．したがって，散乱問題を解いていくためには，とても便利な道具となる．(12.26)の Green 関数の解は，

$$G_\pm(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ikr}}{r} \tag{12.28}$$

であり，$G_+(\boldsymbol{r})$ は外向きの球面波，$G_-(\boldsymbol{r})$ は内向きの球面波を表す．

望ましい漸近形(12.13)をみたすためには，$\varphi_0(\boldsymbol{r})=e^{ikz}$，Green 関数としては外向きの球面波 $G_+(\boldsymbol{r})$ を選べばよい．

したがって，積分方程式

$$\begin{aligned}\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r})&=e^{ikz}+\int d^3r'\,G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\\&=e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{12.29}$$

は(12.13)の漸近形をみたす．(12.29)の右辺第2項の積分は，実質的には $r'\leqq L$ の領域に限られる(図12.3)．いま，r を十分大きくとり，$r\gg r'$ とすれば，

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\simeq r-\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{r}'+O\left(\frac{r'}{r}\right)$$

$$\therefore\quad k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\simeq kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'+O\left(k\frac{r'}{r}\right) \tag{12.30}$$

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\simeq\frac{1}{r}+O\left(\frac{r'}{r^2}\right) \tag{12.31}$$

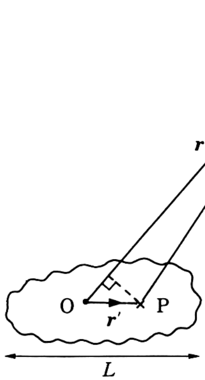


図12.3　ポテンシャルの影響のある領域

ここで，$\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{e}_r$ とした．この両式を $G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ に代入すると，

$$G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\xrightarrow[r\to\infty]{}-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{12.32}$$

となる．これを(12.29)に代入すると，

$$\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r})\xrightarrow[r\to\infty]{}e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3r'e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}U(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}') \tag{12.33}$$

そこで，

$$\begin{aligned}f(\theta)&=-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}U(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\\&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}V(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{12.34}$$

とおけば，境界条件(12.13)に一致する．この $f(\theta)$ が求める散乱振幅である．

12.4 Born 近 似

散乱振幅 $f(\theta)$ を使えば，$\dfrac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2$ に代入することによって，微分断面積を求めることができる．しかし，(12.34)には未知の関数 $\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')$ が含まれているので，微分断面積を計算するのにまだすぐには使えない．

逐次近似

いま，$\boldsymbol{k}_i=k\boldsymbol{e}_z$ とおけば，

$$\varphi_0(\boldsymbol{r})=e^{ikz}=\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}) \tag{12.35}$$

と書ける．積分方程式(12.29)で逐次近似をすれば，

$$\begin{aligned}\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r})=&\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r})+\int d^3r'G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}')\\&+\int d^3r'\int d^3r''G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')G_+(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')U(r'')\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}'')\\&+\cdots\end{aligned} \tag{12.36}$$

となる．(12.36)は $\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r})$ を $U(r)$ のべきに展開した形で摂動論にほかならない．(12.36)を(12.34)に代入すると，

$$\begin{aligned}f(\theta)=&-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')U(r')\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}')\\&-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\int d^3r''\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')U(r')G_+(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')U(r'')\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}'')\\&+\cdots\end{aligned} \tag{12.37}$$

右辺の第１項のみをとる近似を**Born 近似**とよぶ．

Born 近似での散乱振幅

Born 近似での散乱振幅を $f^{(B)}(\theta)$ で表すと，(12.37)より，

$$f^{(B)}(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\exp[-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r}']U(r')$$
$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'}V(r') \tag{12.38}$$

となる．ここで，$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i$ は散乱に際して粒子がポテンシャルから受けとる運動量で，その大きさは図 12.4 から明らかなように，

$$K=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{12.39}$$

となる．(12.38)より，

Born 近似での散乱振幅 $f^{(B)}(\theta)$ は，ポテンシャルの Fourier 変換に比例していることがわかる．

ゆえに，Born 近似での微分散乱断面積は，

$$\frac{d\sigma^{(B)}(\theta)}{d\Omega}=|f^{(B)}(\theta)|^2=\frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int d^3r\ e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}V(r)\right|^2 \tag{12.40}$$

となり，K が大きいとき，r の小さい領域，つまり $V(r)$ のなかのほうが効く．また，K が小さいと，r の大きい領域，つまり $V(r)$ の外のほうまでが効く．したがって，Born 近似の範囲内では，$\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$ を k と θ の関数である(12.39)，すなわち K の関数としてみれば，Fourier 変換によりポテンシャル $V(r)$ を調べることができる[1]．

ポテンシャルが球対称のとき，Born 近似での散乱振幅 $f^{(B)}(\theta)$ は簡単な形になる．$\boldsymbol{K}$ を z 軸にとると，(12.38)より，

$$f^{(B)}(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r)r^2dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^1 d(\cos\theta)e^{-iKr\cos\theta}$$
$$=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)r\frac{\sin Kr}{K}dr \tag{12.41}$$

と簡単化され，

$$\frac{d\sigma^{(B)}(\theta)}{d\Omega}=\frac{4\mu^2}{\hbar^4}\left|\int_0^\infty V(r)r\frac{\sin Kr}{K}dr\right|^2 \tag{12.42}$$

となる．

---

1) K を大きくすればするほど，原子，分子，原子核，素粒子とより小さい構造を調べていくことができる．

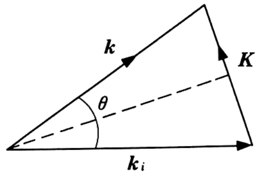


図 12.4

Born 近似の適用限界

くわしい議論は難しいが，ポテンシャルが短距離の場合には，大ざっぱに評価することはできる．(12.34)をみると明らかなように，Born 近似が適用できるとすると，$\varphi^{(+)}$ はポテンシャルの及ぶ範囲で，つまり，$V(r)\neq 0$ の領域の内部で，入射平面波とあまり違ってはならない．

そのためには，(12.29)の厳密な表式において，

$$|e^{ikz}|\gg\left|\int d^3r' G_+(0-\boldsymbol{r}')U(r')\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\right| \tag{12.43}$$

であることが必要である．そこで，とくに井戸型ポテンシャルの場合にどうなるかを調べてみよう．

例題 井戸型ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 (r<a \text{ のとき}) \\ &= 0 \quad (r>a \text{ のとき}) \end{aligned}$$

による散乱問題を考え，Born 近似がよい近似であるための条件を求めよ．

解 (12.43)の右辺で $\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r}')$ を $\varphi_0(\boldsymbol{r})$ でおきかえると，

$$\begin{aligned} &=\left|\frac{1}{4\pi}\int_{r'<a}d^3r'\frac{e^{ikr'}}{r'}\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0\exp(i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}')\right| \\ &=\left|\frac{\mu V_0}{\hbar^2}\int_0^a r'dr'e^{ikr'}\int_{-1}^1 d(\cos\theta)e^{ikr'\cos\theta}\right| \\ &=\frac{\mu|V_0|}{\hbar^2}\left|\frac{1}{ik}\left(\frac{e^{2ika}-1}{2ik}-a\right)\right| \end{aligned}$$

(12.43)の左辺＝1 だから，

$$1\gg\frac{\mu|V_0|}{2\hbar^2k^2}|e^{2ika}-1-2ika| \tag{a}$$

を得る．

(i) 低いエネルギーでは，$ka\lesssim 1$ であるから，

$$|e^{2ika}-1-2ika|\approx 2k^2a^2$$

$$\therefore \quad 1 \gg \frac{\mu |V_0| a^2}{\hbar^2} \qquad ⓑ$$

条件ⓑは，このポテンシャルに束縛状態が存在しない条件に対応する(第3章　3.5節参照)．したがって，低エネルギーでBorn近似がよい近似であるためには，ポテンシャルの深さがⓑをみたすように十分浅いことが必要である．

(ii) 高いエネルギーでは，$ka \gg 1$ であるから，

$$|e^{2ika} - 1 - 2ika| \approx 2ka$$

ゆえに，ⓐは，

$$1 \gg \frac{\mu a^2 |V_0|}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{ka} \qquad ⓒ$$

となり，$k \to \infty$ に対して常に成り立つ．Born近似は，高エネルギーでは常によい近似になっている．■

［問題1］　3次元のYukawaポテンシャル

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r} \qquad ①$$

による散乱を考える．つぎの問いに答えよ．

(1) 微分断面積および全断面積をBorn近似で計算せよ．

(2) Born近似がよい近似であるための条件を求めよ．

(3) $V_0 = 10$ MeV, $\alpha^{-1} = 1.3$ fm $= 1.3 \times 10^{-13}$ cm で，重心系での陽子の運動量が50 MeV・c^{-1} のとき，陽子—中性子散乱の全断面積をmbの単位で求めよ．ただし，陽子，中性子の質量を940 MeVとせよ．

［解］　(1) (12.41)にポテンシャル①を代入すると，

$$f^{(\mathrm{B})}(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty \left(-V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r}\right) r \frac{\sin Kr}{K} dr$$

$$= \frac{2\mu V_0}{\alpha \hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + K^2} \qquad ⓐ$$

$$\therefore \quad \frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu V_0}{\alpha \hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\left[\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right]^2} \qquad ⓑ$$

$$\therefore \quad \sigma_{\mathrm{tot}}^{(\mathrm{B})} = \int \frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega} d\Omega = \left(\frac{2\mu V_0}{\alpha \hbar^2}\right)^2 (2\pi) \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{1}{[\alpha^2 + 2k^2(1 - \cos\theta)]^2}$$

$$= \left(\frac{2\mu V_0}{\alpha \hbar^2}\right)^2 \frac{4\pi}{\alpha^2(\alpha^2 + 4k^2)} \qquad ⓒ$$

(2) (12.43)の右辺

$$=\left|\frac{\mu V_0}{\hbar^2\alpha}\right|\left|\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)\int_0^\infty dre^{ikr-\alpha r+ikr\cos\theta}\right|$$

$$=\frac{\mu|V_0|}{\hbar^2\alpha k}\left|\ln\left(1-\frac{2ik}{\alpha}\right)\right|$$

低いエネルギーでは，$k\ll\alpha$ であるから，

$$\ln\left(1-\frac{2ik}{\alpha}\right)\simeq-\frac{2ik}{\alpha}$$

$$\therefore\quad 1\gg\frac{2\mu|V_0|}{\hbar^2\alpha^2} \qquad ⓓ$$

が求める条件である．

高いエネルギーでは，$k\gg\alpha$ であるから，

$$\ln\left(1-\frac{2ik}{\alpha}\right)\longrightarrow\ln\left(-\frac{2ik}{\alpha}\right)$$

$$\therefore\quad 1\gg\frac{\mu|V_0|}{\hbar^2\alpha k}\ln\frac{2k}{\alpha} \qquad ⓔ$$

ゆえに，$k\to\infty$ に対して常に成り立つ．

(3) $V_0=10\text{MeV}$，$2\mu=940\text{MeV}\cdot c^{-2}$，$\hbar c=197\text{MeV}\cdot\text{fm}$，$k=p/\hbar=50$ $\text{MeV}\cdot\hbar^{-1}c^{-1}$，$\alpha^{-1}=1.3\times10^{-13}\text{cm}$

$$\therefore\quad \frac{2\mu V_0}{\alpha\hbar^2}=\frac{2\mu c^2V_0}{\alpha(\hbar c)^2}=0.315\times10^{13}\text{cm}^{-1}$$

$$\therefore\quad \left(\frac{2\mu V_0}{\alpha\hbar^2}\right)^2=0.0991\times10^{26}\text{cm}^{-1} \qquad ⓕ$$

$$\alpha^{-2}=1.69\times10^{-26}\text{cm}^2 \qquad ⓖ$$

$$\alpha^2+4k^2=0.849\times10^{26}\text{cm}^{-2} \qquad ⓗ$$

ⓕ，ⓖ，ⓗをⓒに代入すると，

$$\sigma_{\text{tot}}^{(B)}=2.48\times10^{-26}\text{cm}^2$$

$$=24.8\text{mb} \qquad ⓘ$$

となる． ▮

［問題 2］ 質量 m，電荷 $Z'e$ の入射粒子と，原点に固定された電荷 Ze との間に Coulomb ポテンシャル $V(r)=\dfrac{ZZ'e^2}{r}$ が働いている．つぎの問いに答えよ．

(1) Born 近似で微分断面積を求めよ．

(2) Born 近似で全断面積を計算し，その物理的意味を議論せよ．

［解］ (1)まず，Yukawa ポテンシャル $V(r)=\dfrac{V_0e^{-\alpha r}}{r}$ のとき，Born 近似で，

$$f^{(B)}(\theta)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2 K}\int_0^\infty dr\ e^{-\alpha r}\sin Kr$$

$$=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2+K^2} \qquad ⓐ$$

Coulomb ポテンシャルの場合，正確に解くかわりに，ⓐで $\alpha\to 0$，$V_0=ZZ'e^2$ とおくと，

$$f^{(B)}(\theta)=-\frac{2mZZ'e^2}{\hbar^2}\frac{1}{K^2}$$

$$\therefore\quad \frac{d\sigma^{(B)}}{d\Omega}=|f^{(B)}(\theta)|^2=\frac{1}{16E^2}\frac{(ZZ'e^2)^2}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \qquad ⓑ$$

これは，古典的 Rutherford 散乱で得た結果と同じである．

(2) ⓑ式より明らかなように，Coulomb 散乱は，前方に鋭いピークをもつ．これを $d\Omega=\sin\theta\ d\theta\ d\varphi$ につき積分して，$\sigma_{\rm tot}^{(B)}$ を求めると発散してしまう．

これは，一見困るように思えるが，クーロン力の到達距離が無限大であることを考えると，むしろ自然である．また現実には，たとえば，陽子があるとそのまわりに反対符号の電荷の電子がくっついてスクリーンしてしまうので純粋の Coulomb 相互作用は存在しない．したがって問題はない． ■

12.5 部分波と位相のずれ

いままでに述べてきた散乱理論では，すべての角運動量状態をまとめて議論してきた．しかし，5.2 節で扱ったように，角運動量は運動の恒量なので(低いエネルギー領域では)，別々の角運動量状態に分解して考えたほうが便利なことが多い．そこで，$\hat{H}$，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$，$\hat{L}_z$ の同時固有関数，すなわち，部分波を調べてみよう．

ポテンシャル $V(r)$ での部分波

中心力ポテンシャル $V(r)$ による1粒子の散乱を考えると，$\hat{H}$，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$，$\hat{L}_z$ の同時固有関数((5.44)，(5.46)参照)は，

$$R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)=\frac{\chi_l(r)}{r}Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (12.44)$$

で表される．$\chi_l(r)$ の従う方程式は，(5.47)より，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\chi_l(r)=E\chi_l(r) \qquad (12.45)$$

という1次元の方程式であり，原点での境界条件は，$\chi_l(0)=0$ となる．すなわち，質量 μ の粒子が，

$$V_{\rm eff}(r)=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\quad (r>0)$$

$$V_{\rm eff}(r)=\infty\quad (r<0)$$

の影響のもとに運動する1次元の問題に帰着する．

位相のずれの決定

ポテンシャル $V(r)$ が与えられたとき，位相のずれを実際どのように計算したらよいかを考えよう．$r>a$ で $V(r)=0$ であるとき，その領域での動径方程式は，(12.45) より，

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]\chi_l(r)=0 \tag{12.46}$$

となり，$\chi_l(r)/r(=R_l(r))$ は，正則な解と正則でない解の線型結合として，

$$R_l(r)=\frac{\chi_l(r)}{r}=Aj_l(kr)+Bn_l(kr)\qquad (r>a) \tag{12.47}$$

のように書ける．$j_l(kr)$，$n_l(kr)$ の漸近形を使うと，

$$R_l(r)=\frac{\chi_l(r)}{r}\underset{r\to大}{\simeq}A\frac{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr}-B\frac{\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \tag{12.48}$$

を得る．ポテンシャル $V(r)$ がいたるところでゼロならば，$\chi_l(0)=0$ という境界条件のため，$r<a$ では，$B=0$ とならねばならない．したがって，A に比べて B の大きさがどのくらいあるかということが，散乱の強さの目安を与えることになる．

B/A の値を求めるには，どうすればいいだろう．それには原点での境界条件 ($\chi_l(0)=0$) をみたすようなSchrödinger 方程式の解を $r<a$ で求め，この解を $r=a$ で $r>a$ での解(12.47)になめらかにつなげばよい．そうすると，B/A を求めることができる．

例題 1　球対称な井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & (r<a\text{ のとき})\\ 0 & (r>a\text{ のとき})\end{cases}$$

による質量 m の粒子の散乱を考える．Schrödinger 方程式(12.45)を解いて，B/A を求めよ．

解　$E>0$ であるから，$k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$ とおく．

$r>a$ での解は，(12.47)で与えられ，

$r<a$ での解は，$\alpha^2=\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$ を使って，

$$R_l(r)=Cj_l(\alpha r)$$

$r=a$ で $\left[\dfrac{1}{R_l}\dfrac{dR_l(r)}{dr}\right]_{r=a}$ をなめらかにつなぐと,

$$a\left.\frac{\dfrac{dj_l(\rho)}{d\rho}}{j_l(\rho)}\right|_{\rho=\alpha a}=k\left.\frac{\dfrac{dj_l(\rho)}{d\rho}+\dfrac{B}{A}\dfrac{dn_l(\rho)}{d\rho}}{j_l(\rho)+\dfrac{B}{A}n_l(\rho)}\right|_{\rho=ka} \qquad ⓐ$$

この式より B/A は求まる.

ⓐの左辺$=\gamma_l$ とおくと,

$$\frac{B}{A}=-\frac{\gamma_l j_l(ka)-kj_l'(ka)}{\gamma_l n_l(ka)-kn_l'(ka)}$$

となる. ▮

$r<a$ で $V(r)\neq0$ のとき(12.48)を書きかえると,

$$R_l(r)\sim C\frac{\sin\left(kr-\dfrac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}{kr}$$

となるが, $C=k$ とおいて,

$$R_l(r)\sim\frac{\sin\left(kr-\dfrac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}{r} \tag{12.49}$$

すなわち,

$$\chi_l(r)\sim\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{12.50}$$

と規格化しておくと便利である. この δ_l を l-波の**位相のずれ**とよぶ. 上で議論したように, いたるところで $V(r)=0$ ならば(12.48)の B はゼロとなり, $\delta_l=0$ である. (12.48), (12.49) より $B/A=-\tan\delta_l(k)$ であり, これをパラメーターとして導入すると, 断面積を表すのに非常に役に立つことがわかる. すなわち,

散乱の結果, 遠く離れたところでの l-波の動径波動関数の変化は, 散乱の起こらない場合 $(\delta_l=0)$ からの位相の変化だけである.

部分波展開

微分断面積または散乱振幅を位相のずれ δ_l を使って表すために, $\varphi^{(+)}(r,\theta)$ を(12.44)を用いてつぎのように展開してみよう. すなわち, ちょっと天下り的に,

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)c_l\frac{\chi_l(r)}{kr}P_l(\cos\theta) \tag{12.51}$$

と展開し,

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)=e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (r\to\infty) \tag{12.52}$$

という境界条件をみたすように c_l を決める. いいかえると,

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)-e^{ikz}\underset{r\to\infty}{\sim} f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

すなわち，$\dfrac{e^{-ikr}}{r}$ という項を含まないという条件を課してやる．

まず，準備として，平面波の球面波による展開公式

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{12.53}$$

よりはじめよう．

例題 2 上式を証明せよ．

解 e^{ikz} はポテンシャル $V=0$ の Schrödinger 方程式の解である．一方，(12.45) で $V=0$ のときの原点での部分波振幅の正しい解は，$R_l(r)=j_l(kr)$ である．したがって，

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty} a_l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \qquad ⓐ$$

と展開できる．a_l を決めるために，ⓐの両辺で，$(kr)^l(\cos\theta)^l$ に比例する項を $kr\to 0$ のとき比較してみよう．

$$P_l(z)\underset{z\to 0}{\sim}\frac{(2l)!}{2^l(l!)^2}z^l \qquad ⓑ$$

$$j_l(kr)\underset{r\to 0}{\sim}\frac{2^l l!(kr)^l}{(2l+1)!} \qquad ⓒ$$

を用いると，

$$\frac{(ikr\cos\theta)^l}{l!}=a_l\frac{2^l l!(kr)^l}{(2l+1)!}\frac{(2l)!}{2^l(l!)^2}(\cos\theta)^l$$

より，

$$a_l=i^l(2l+1) \qquad ⓓ$$

が得られる[1]．これをⓐに代入することにより，(12.53) が導ける． ■

本論にもどって，(12.51) の c_l を決めていこう．

(12.53) に j_l の漸化式 (5.63) を代入すると，

$$e^{ikz}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\left[\exp\left\{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right\}\right.$$
$$\left.-\exp\left\{-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right\}\right]P_l(\cos\theta) \tag{12.54}$$

一方，(12.51)，(12.50) より，

---

1) (12.51) のように天下り的に展開した理由は，この式より明らかであろう．

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\left[c_l\exp\left\{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right\}\right.$$
$$\left.-c_l\exp\left\{-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right\}\right]P_l(\cos\theta) \tag{12.55}$$

辺々引き算をすると，

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)-e^{ikz}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\left[c_l\exp\left\{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right\}\right.$$
$$-c_l\exp\left\{-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right\}-\exp\left\{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right\}$$
$$\left.+\exp\left\{-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right\}\right]P_l(\cos\theta) \tag{12.56}$$

を得る．e^{-ikr}/r 項が存在しないためには，

$$c_l=\exp(i\delta_l) \tag{12.57}$$

でなければならない．(12.57)を(12.56)に代入すると，

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)-e^{ikz}$$
$$\underset{r\to\infty}{\sim}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\frac{\exp\left[i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]}{2ikr}[\exp(2i\delta_l)-1]P_l(\cos\theta) \tag{12.58}$$

となり，e^{ikr}/r の係数を取り出すと，$f(\theta)$ が求まり，

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\exp(2i\delta_l)-1}{2ik}P_l(\cos\theta)$$
$$=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp(i\delta_l)\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{12.59}$$

となる．

$$\exp[2i\delta_l(k)]\equiv S_l(k) \tag{12.60}$$

とも書き，部分波振幅 $f_l(k)$ を具体的に，

$$f_l(k)=\frac{S_l-1}{2ik}=\frac{\exp(2i\delta_l)-1}{2ik}=\frac{\exp(i\delta_l)\sin\delta_l}{k}$$
$$=\frac{1}{k\cot\delta_l-ik} \tag{12.61}$$

と表すことができる．これで，散乱振幅 $f(\theta)$ が位相のずれ δ_l の関数として表されたことになる．この展開を**部分波展開**とよぶ．

散乱の物理的内容はつぎのように理解することができる．平面波は e^{ikr}/r の形の球対称な外向波と e^{-ikr}/r の形の球対称な内向波から成り立っている．しかし，散乱ポテンシャルが存在すると，内向波は同じであるが，外向波の係数のみが平面波の

それと比べて $\exp(2i\delta_l)$ だけ異なる．すなわち，散乱ポテンシャルの効果は，外向きの部分波のひとつひとつの位相をずらすことにある．

$V_0=0$ の場合の動径方向の波動関数は，正弦関数(点線)で与えられる．引力ポテンシャル($V_0<0$)の場合には，$r<a$ で k が大きくなり，かつ $\chi_l(0)=0$ なので，$\chi_l(r)$ は，もっとはやく振動しなければならない．これは，波動関数 $\chi_l(r)$ を中心に引きこむ効果をもち $\delta_l>0$ となる．一方，斥力ポテンシャル($V_0>0$)の場合には，波動関数 $\chi_l(r)$ が r の大きい方向へ押し出される．したがって，$\delta_l<0$ となる(図 12.5(a), (b))．

光学定理(optical theorem)

11.2 節で原点を中心とする大きな球面を考え，この球面に流れこむ粒子数と球面から流れ出る粒子数が等しいという確率の保存がみたされるためには，いわゆる**光学定理**(12.24)が成り立っていなければならないことを述べた．

例題 3 光学定理

$$\mathrm{Im} f(\theta=0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{tot}} \qquad ①$$

を Schrödinger 方程式を解いて証明せよ．

解 (12.59)で得られた $f(\theta)$ を用いて，

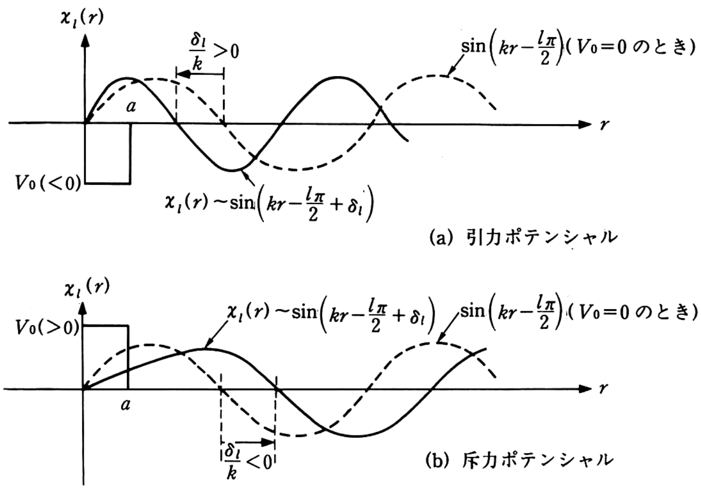


図 12.5 δ_l と $V(r)$ の符号の関係
$\chi_l(r)$ を r に対して描いた図．(a)，(b)ともに，点線の曲線は $V_0=0$ の場合．

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2=f(\theta)^*f(\theta)$$

$$=\frac{1}{k^2}\sum_l\sum_{l'}(2l+1)(2l'+1)\exp\left[i\left(\delta_l-\delta_{l'}\right)\right]\cdot$$

$$\cdot\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \qquad ⓐ$$

が得られる. ⓐを全角度で積分し, $\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)=\frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}$ を使うと,

$$\sigma_{\text{tot}}=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad ⓑ$$

となる. 一方, (12.59) より,

$$\text{Im}f(\theta=0)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad ⓒ$$

である. かくして, ⓑ, ⓒを比較して,

$$\text{Im}f(\theta=0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_{\text{tot}} \qquad ⓓ$$

が得られる. よって, 光学定理が証明された. ∎

衝突パラメーター

中心力ポテンシャルによる古典粒子の散乱を考えよう. 力の中心から入射運動量 $\boldsymbol{p}$ を通る直線までの距離を衝突パラメーターといい, b で表す. 入射粒子のエネルギーを決めると, 衝突パラメーター b, あるいは角運動量 $L=bp$ に応じて散乱角も決まった. 量子力学における散乱は, 古典的な散乱の現象とは非常に異なった現象である. それは, 本質的に波の散乱という現象であるからである. それにもかかわらず, いくつかの類似点がある. 量子論での散乱でも, b のもっともたしからしい値は, 古典論との類似で,

$$\hbar\sqrt{l(l+1)}=\hbar kb_l \qquad (12.62)$$

をみたす値の程度である. ゆえに, $l\gg1$ ならば,

$$b_l=\frac{1}{k}\sqrt{l(l+1)}\simeq\frac{1}{k}\left(l+\frac{1}{2}\right)$$

であるから, $\Delta l=1$ に対応して $\Delta b_l=1/k$ である.

$$b_l\pm\frac{1}{2}\Delta b_l=\frac{1}{k}\left(l+\frac{1}{2}\right)\pm\frac{1}{2k}=\begin{cases}\frac{1}{k}(l+1)\\ \frac{1}{k}l\end{cases}$$ (複号同順)　なので, 量子的粒子の散

乱に対する角運動量が l の波動の寄与と，古典的粒子のビームの散乱において衝突パラメーターが $(l+1)/k$ と l/k との間にある粒子の寄与との間に，ある類似が存在する．

このように考えると，ポテンシャルの及ぶ領域が a のときは $b_l<a$ でのみ反応が起こるので，ごく低いエネルギーでは s-波の散乱のみを考えれば十分である[1]．

例題 1　剛体球ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}\infty & (r<a)\\ 0 & (r>a)\end{cases}$$

による s-波散乱を考える．

(1) s-波の位相のずれ $\delta_0(k)$ を求めよ．

(2) 低エネルギー極限で全断面積を求めよ．

解　(1) $\delta_0(k)$ を計算するために，$l=0$ の動径波動方程式

$$r>a \text{ で，}\left(\frac{d^2}{dr^2}+k^2\right)\chi_0(r)=0 \qquad ⓐ$$

$$\chi_0(r=a)=0$$

を考える．ⓐの解は定数因子を除いて，

$$r>a \text{ で，}\chi_0(r)=\sin k(r-a) \qquad ⓑ$$

一方，定義により，$\chi_0(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\sin[kr+\delta_0(k)]$　ⓒ

$$\therefore\quad \delta_0(k)=-ka \qquad ⓓ$$

(2)　$$\lim_{k\to\infty}\sigma_{\text{tot}}=\lim_{k\to\infty}\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0(k)=4\pi a^2 \qquad ⓔ$$

ゆえに，幾何学的断面積 πa^2 の 4 倍となる．■

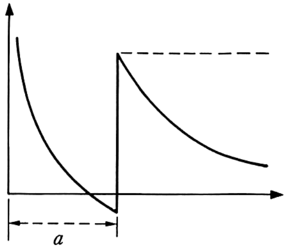
[問題 3]　核子―核子散乱で力の到達距離が 1.4 fm としよう．このとき，どのくらいのエネルギーまで s-波だけの散乱と考えてよいか．ただし，核子の質量を M とする．

[解]　核力のポテンシャルを $V(r)$ とすると，角運動量 l の部分波に対する有効ポテンシャルは，

$$V_{\text{eff}}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)$$

で与えられる．ここで換算質量 $\mu=M/2$ である．つまり，$V(r)$ の到達距離を a とすると，エネルギー E が $\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{l(l+1)}{a^2}$ を超えたときにのみ，l-波が遠心力障壁

1)　厳密な議論は 12.6 節で与える．



図

を超えて核力を感じることができる．いいかえると，エネルギー E が $\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{2}{a^2}$ より十分小さいときには，s-波だけが核力の影響を受けることができる．$a=1.4$ fm とおくと，求める条件は，

$$E_{\rm CM} \ll \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{2}{a^2} = \frac{(197\,{\rm MeV}\cdot{\rm fm})^2}{2\dfrac{940}{2}{\rm MeV}}\frac{2}{(1.4\,{\rm fm})^2}$$

$$=42\,{\rm MeV}$$

$$\therefore\quad E_{\rm lab}=2E_{\rm CM}\ll 84\,{\rm MeV}\quad ▮$$

［問題 4］ ポテンシャル，$V(r)=\begin{cases} V_0>0 & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases}$

による散乱について，非常に低いエネルギーに対する全断面積を求めよ．

［解］ $\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}=V_0-E>0$ とおけば，$r<a$ での解は $\chi_0(r)=A\sinh\beta r$ $(r<a)$．$r>a$ では前と同じであるから，$\beta\coth\beta a=k\cot(ka+\delta_0)$．

$$\therefore\quad \delta_0=ka\left(\frac{\tanh\beta a}{\beta a}-1\right),\qquad \therefore\quad \sigma_{\rm tot}=4\pi a^2\left(\frac{\tanh\beta a}{\beta a}-1\right)^2\quad ▮$$

［問題 5］ 剛体球ポテンシャル，$V(r)=\begin{cases} \infty & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases}$ による散乱を考える．l-波の位相のずれを求めよ．

［解］ (12.47)より，$r>a$ での解は，

$$R_l(r)=\frac{\chi_l(r)}{r}=Aj_l(kr)+Bn_l(kr),\quad R_l(a)=0$$

$$\therefore\quad Aj_l(ka)+Bn_l(ka)=0$$

$$\therefore\quad \tan\delta_l(k)=-\frac{B}{A}=\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}\qquad\blacksquare$$

12.6 いくつかの応用

位相のずれに対する Born 近似

位相のずれ $\delta_l(k)$ を求めるためには，原則として，Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)+k^2\right]\chi_l(r)=0 \tag{12.63}$$

を解かねばならない．しかしながら，ポテンシャル $V(r)$(したがって $U(r)$)が十分小さいときには，この方程式の解 $\chi_l(r)$ は $V(r)=0$ の場合の解 $krj_l(kr)$ とわずかしか違わない．このような場合には，$\delta_l(k)$ に対して簡単な近似式を得ることができる．

$\chi_l(r)$ を(12.63)の規格化された解とし，$U(r)=0$ の解を $\varphi_l(r)$ としよう．もちろん，$\chi_l(0)=0$，$\varphi_l(0)=0$ はみたされているとする．(12.63)より，

$$U(r)\chi_l(r)=\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]\chi_l \tag{12.64}$$

$$0=\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]\varphi_l \tag{12.65}$$

φ_l と(12.64)の積から，χ_l と(12.65)の積を辺々引き算すると，$U\chi_l\varphi_l=\varphi_l\frac{d^2}{dr^2}\chi_l-\chi_l\frac{d^2}{dr^2}\varphi_l$ が得られる．この両辺を r について積分すると，

$$\begin{aligned}\int_0^\infty U\chi_l\varphi_l dr&=\int_0^\infty\left(\varphi_l\frac{d^2\chi_l}{dr^2}-\chi_l\frac{d^2\varphi_l}{dr^2}\right)\\&=\left[\varphi_l\frac{d\chi_l}{dr}-\chi_l\frac{d\varphi_l}{dr}\right]_0^\infty\\&=\lim_{r\to\infty}\left[\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)k\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right.\\&\qquad\left.-\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)k\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]\\&=-k\sin\delta_l\end{aligned} \tag{12.66}$$

となる．$\varphi_l(r)=krj_l(kr)$ を(12.66)に代入すると，

$$\sin\delta_l(k)=-\int_0^\infty U\chi_l(r)rj_l(kr)dr \tag{12.67}$$

$U(r)$ が十分小さいときには，$\chi_l(r)$ は，$krj_l(kr)$ とわずかしか違わず，位相のずれ $\delta_l(k)$ も小さくなる．このときには，(12.67)の $\chi_l(r)$ を $krj_l(kr)$ におきかえても大き

な誤差はない．その結果は，

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) \simeq -\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)j_l^2(kr)r^2dr \tag{12.68}$$

で，これが Born 近似において位相のずれを表す式である．$kr \ll 1$ のとき，$j_l(kr) \sim \dfrac{2^l l\,!}{(2l+1)\,!}(kr)^l$ なので，(12.68)に代入すると，

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) \sim k^{2l+1} \tag{12.69}$$

のようにゼロに近づく．よって，到達距離が有限なポテンシャルによる低エネルギーの散乱では，s-波散乱が重要な役割をはたすことが明らかになった．

共鳴散乱

共鳴の現象はミクロの世界において，しばしばみられるものである．たとえば，原子物理，核物理，素粒子物理で，あるきまった角運動量をもつ部分波に対する断面積が著しいピークを示すことがしばしばある．この節では，そのような共鳴の現象を扱う．

12.5節の例題1で，引力ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases} -V_0 & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases} \tag{12.70}$$

による質量 m の井戸型散乱を考え，Schrödinger 方程式を解いて l-波の位相のずれを求め，

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{B}{A} = \frac{\alpha j_l'(\alpha a)j_l(ka) - kj_l'(ka)j_l(\alpha a)}{\alpha j_l'(\alpha a)n_l(ka) - kn_l'(ka)j_l(\alpha a)} \tag{12.71}$$

を得た．ただし，$\alpha^2 = \dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$.

このような系では図12.6に示すように，遠心力ポテンシャル障壁のために，粒子が内側に捕らわれて束縛状態に似た状態になることがある．このような状態は，トンネル効果によって遠心力ポテンシャルの外へ漏れ出し，有限な寿命を持つ．これを準束縛状態，または共鳴状態という．このような共鳴状態のエネルギーは，次に示すように，$\cot\delta_l(k)$ をゼロとおくことにより求まる．

一般に，入射エネルギーが共鳴状態のエネルギーを通過して増加すると，散乱の位相のずれは $\pi/2$ または $3/2\,\pi$ を通過して増加し，対応する部分波の断面積 $\sigma_l = \dfrac{4\pi(2l+1)}{k^2}\sin^2\delta_l(k)$ は，取りうる最大値 $\dfrac{4\pi(2l+1)}{k^2}$ となるはずである．実際，

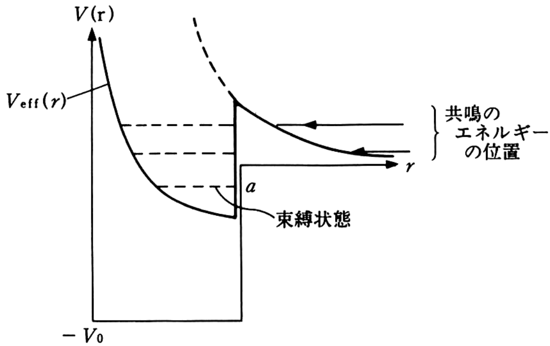


図 12.6 引力の井戸型ポテンシャルによる束縛状態と共鳴状態

$\delta_l(k) \sim \pi/2$ または $3/2\,\pi$ となるエネルギーを $E_R = \dfrac{\hbar^2}{2m} k_R^2$ で示せば，入射エネルギーが E_R に近いときの σ_l は図 12.7 のように共鳴的ふるまいを示す．

つぎに，散乱振幅が共鳴エネルギー E_R の近くで，どのように変化するかをもう少しくわしく調べてみよう．δ_l が小さい側から $\pi/2$ または $3\pi/2$ を横切るときに共鳴状態が起こる．すなわち，$\cot \delta_l$ は正の側からゼロを通過するであろう．よって，

$$\cot \delta_l = \cot \delta_l|_{E=E_R} - c(E-E_R) + O[(E-E_R)^2] \tag{12.72}$$

と展開すると，部分波振幅は，

$$f_l(k) = \frac{\exp(i\delta_l)\sin \delta_l}{k} = \frac{1}{k}\,\frac{1}{\cot \delta_l - i}$$

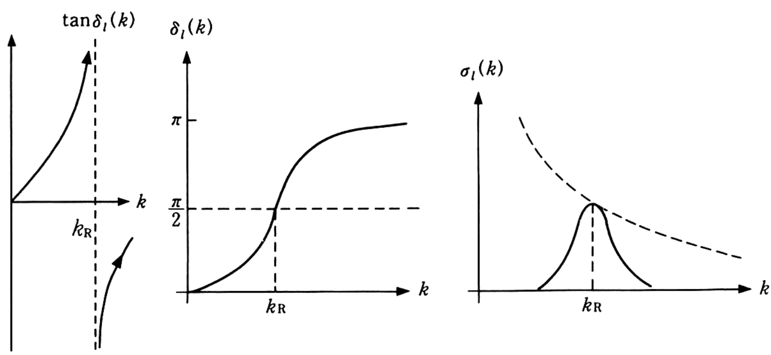


図 12.7

$$=\frac{1}{k}\frac{1}{[-c(E-E_R)-i]}=-\frac{\frac{1}{c}}{k\left[E-E_R+\frac{i}{c}\right]}$$

となる．すなわち，$\frac{d}{dE}\cot\delta_l=-c\equiv-\frac{2}{\Gamma}$ と定義とすると，

$$f_l(k)=-\frac{\frac{\Gamma}{2}}{k\left[E-E_R+\frac{i\Gamma}{2}\right]} \tag{12.73}$$

となり，部分波断面積は，

$$\sigma_l=\frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\sin^2\delta_l=4\pi(2l+1)|f_l|^2$$

$$=\frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E-E_R)^2+\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \tag{12.74}$$

となる．これを **Breit-Wigner の公式**という．$E-E_R=\pm\Gamma/2$ のとき，σ_l の大きさはピークの値の半分までおちる．この Γ を**共鳴の幅**と定義する．

［問題 6］ 球形の井戸型ポテンシャル $V(r)=\begin{cases}-V_0 & (r<a)\\ 0 & (r>a)\end{cases}$ による質量 m の粒子の散乱を考えよう．

(1) 非常に低いエネルギーの散乱に対する全断面積を計算せよ．

(2) s-波の共鳴状態における最大の断面積はいくらか．

(3) 散乱断面積がほとんどゼロになる場合はあるか．

［解］ (1) ごく低いエネルギーの散乱では主に s-波が効くので，$l=0$ の波動関数を考えよう．

$r<a$ での原点で正則な解は，$\alpha^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$ を使って，

$$\chi_0(r)=rR_0(r)=A\sin\alpha r \quad ⓐ$$

$r>a$ での解

$$\chi_0(r)=\sin(kr+\delta_0) \quad ⓑ$$

に $r=a$ でなめらかにつなぐため，$\frac{1}{\chi_0}\frac{d\chi_0(r)}{dr}\Big|_{r=a}$ を等しくおくと，

$$\alpha\cot\alpha a=k\cot(ka+\delta_0) \quad ⓒ$$

ⓒの左辺は有限だから，$k \to 0$ の極限では $\sin(ka+\delta_0)$ もゼロに近づかねばならないから，$\sin(ka+\delta_0) \sim ka+\delta_0$.

$$\therefore \quad \alpha \cot \alpha a \simeq \frac{k}{ka+\delta_0}$$

$$\therefore \quad \delta_0 = ka\left(\frac{\tan \alpha a}{\alpha a}-1\right) \qquad ⓓ$$

$$\therefore \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{\sin^2\delta_0}{k^2} = a^2\left(\frac{\tan \alpha a}{\alpha a}-1\right)^2 \qquad ⓔ$$

$$\therefore \quad \sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2\left(\frac{\tan \alpha a}{\alpha a}-1\right)^2 \qquad ⓕ$$

(2) $\alpha a = (\pi/2)n$　(n は奇の整数)のとき，ⓕの $\tan \alpha a \to \infty$ になり $\sigma_{\text{tot}} \to \infty$ になる．ⓒを導くまでには $ka \ll 1$ の仮定しか使っていないから，この式から出発する．αa が上の条件をみたすとき，$\cos(ka+\delta_0)=0$．ゆえに $\sin(ka+\delta_0)=1$．$ka \ll 1$ だから $\sin\delta_0 \simeq 1$．したがって，s-波の共鳴状態における最大の断面積は $\alpha a = (\pi/2)n$　(n は奇の整数)のときに得られ，その大きさは $4\pi/k^2$ となる．

(3) ⓕより $\tan \alpha a = \alpha a$ をみたす入射エネルギーで，散乱断面積がほとんどゼロとなる．　▮

[問題 7]　井戸型ポテンシャル(12.70)による質量 m の粒子の散乱を考えたとき，位相のずれ $\delta_l(k)$ は(12.71)で与えられた．つぎの問いに答えよ．

(1) $ka \ll l$ のとき，$\tan\delta_l(k)$ の近似式を求めよ．

(2) ポテンシャルが十分深くて，$\alpha a \gg l \gg ka$ をみたすとき，束縛状態，共鳴状態のエネルギーの近似式を求めよ．

[解]　(1) 付録 A より，$\rho \ll l$ のとき，

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \quad j_l'(\rho) \approx \frac{l\rho^{l-1}}{(2l+1)!!}$$
$$n_l(\rho) \approx -\frac{(2n-l)!!}{\rho^{l+1}}, \quad n_l'(\rho) \approx \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+2}}(l+1) \qquad ⓐ$$

これらを(12.71)に代入すると，

$$\tan\delta_l(k) \simeq \frac{2l+1}{[(2l+1)!!]^2}(ka)^{2l+1}\frac{lj_l(\alpha a)-\alpha a j_l'(\alpha a)}{(l+1)j_l(\alpha a)+\alpha a j_l'(\alpha a)} \qquad ⓑ$$

(2) $\rho \gg l$ のとき，

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho-\frac{l\pi}{2}\right), \quad j_l'(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\cos\left(\rho-\frac{l\pi}{2}\right) \qquad ⓒ$$

ⓑを用いて，$\tan\delta_l(k) \to \infty$ になるのは，

$$(l+1)j_l(\alpha a)+\alpha a j_l'(\alpha a)=0 \tag{ⓓ}$$

のときである．$\alpha a \gg l$ だから，ⓒが使えて，

$$\frac{l+1}{\alpha a}\sin\left(\alpha a-\frac{l\pi}{2}\right)+\cos\left(\alpha a-\frac{l\pi}{2}\right)=0$$

$$\therefore\quad \tan\left(\alpha a-\frac{l+1}{2}\pi\right)\simeq\frac{l+1}{\alpha a} \tag{ⓔ}$$

右辺はとても小さいので，

$$\alpha a-\frac{l+1}{2}\pi\simeq n\pi+\frac{l+1}{\alpha a} \tag{ⓕ}$$

$|E|\ll V_0$ のとき，$\alpha\simeq\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}\left(1+\dfrac{E}{2V_0}\right)$ だから，$\dfrac{l+1}{\alpha a}\approx 0$ と近似して，

$$\frac{E}{2V_0}=-1+\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}}\left(n+\frac{l+1}{2}\right)\pi \tag{ⓖ}$$

を得る．　▮

12.7　Coulomb 散乱

いままでの議論は，すべて，相互作用が短距離力であるという仮定に基づいていた．ところで，2つの粒子が Coulomb 力で相互作用する場合，おたがいがいくら離れても相互作用が残るために，2粒子の波は自由な平面波には近づけない．しかし一方では，厳密に解ける数少ない例でもある．したがって，Coulomb 力による散乱は，散乱理論のなかで特徴的なものの1つである．

Coulomb 相互作用をしている電荷 Ze，$Z'e$ をもつ2粒子の Schrödinger 方程式は，重心を分離して相対座標になおしてしまえば，換算質量 μ を使って，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+\frac{ZZ'e^2}{r}\right)\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{12.75}$$

となる．ここで，

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}=\frac{1}{2}\mu v^2 \tag{12.76}$$

$$\gamma=\frac{ZZ'e^2}{\hbar v} \tag{12.77}$$

とおくと，(12.75)は，

$$\left(\Delta+k^2-\frac{2\gamma k}{r}\right)\varphi(\boldsymbol{r})=0 \tag{12.78}$$

と書ける．この方程式は，

$$\varphi_{\text{Coul}}(r)=e^{ikz}f(r-z) \tag{12.79}$$

という形の正則解をもつ．

実際，この式を(12.78)に代入し，$\xi=r-z$ とおけば，(12.78)は，

$$\xi\frac{d^2f}{d\xi^2}+(1-ik\xi)\frac{df}{d\xi}-\gamma kf=0 \tag{12.80}$$

となる．合流型の超幾何関数 $F(a\,;b\,;z)$ を解にもつ微分方程式

$$z\frac{d^2F}{dz^2}+(b-z)\frac{dF}{dz}-aF=0 \tag{12.81}$$

は，c を定数として

$$f(\xi)=cF(-i\gamma\,;1\,;ik\xi) \tag{12.82}$$

とおけば，方程式(12.80)と同じになる．

付録 A を参照して，Coulomb 波動関数の漸近形を r^{-1} のオーダーの項までとると，

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{Coul}}(r)\underset{|r-z|\to\infty}{\sim}&\exp\left[i\{kz+\gamma\ln k(r-z)\}\right]\left[1-\frac{\gamma^2}{ik(r-z)}+\cdots\right]\\&+f_{\text{C}}(\theta)\frac{1}{r}\exp\left[i(kr-\gamma\ln 2kr)\right]\end{aligned} \tag{12.83}$$

となる．ここに，

$$f_{\text{C}}(\theta)=\frac{\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)\right]}{2ik\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\,\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)} \tag{12.84}$$

である．このように，入射波は原点から限りなく遠いところでも対数的な歪みを受けるから，平面波と同じものとはみなされない．それにもかかわらず，負のきわめて大きい z の値に対しては，確率の流れの密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\dfrac{1}{\mu}\text{Re}\left[\varphi^*(r)\dfrac{\hbar}{i}\nabla\varphi\right]$ を計算すると，$j_{\text{inc}}=v=\dfrac{\hbar k}{\mu}$ になる．このことにより(12.83)の第 1 項が入射波であるという解釈が正当化される．

同様に，散乱波に対しても，出ていく波に特徴的な $\dfrac{e^{ikr}}{r}$ という形をとらず，対数的な歪みを受ける．それにもかかわらず，散乱波に対する確率の流れの密度 j_{sc} を計算すると，たしかに動径方向に r の増す方向を向いており，$j_{\text{sc}}=\dfrac{v|f_{\text{C}}(\theta)|^2}{r^2}$ となり散

乱波の形をとる．したがって，Coulomb 散乱の微分断面積は次式で与えられる．

$$\frac{d\sigma_C}{d\Omega}=|f_C(\theta)|^2$$

$$=\frac{1}{4k^2\sin^4\dfrac{\theta}{2}}\left|\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\right|^2$$

$$=\frac{(ZZ'e^2)^2}{16E^2}\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \tag{12.85}$$

これはちょうど，Rutherford が古典力学を使って求めた公式と一致している．それゆえ，量子論においても Rutherford の古典的な公式は成り立つ．

12.8 同種粒子の散乱

2 つの同種粒子が散乱する場合には，Pauli の原理によって，粒子のスピンが整数(Bose 粒子)か半整数(Fermi 粒子)かに応じて，波動関数は 2 つの粒子の入れかえに対して対称か反対称でなければならない．2 粒子の入れかえは，重心を静止したままの座標系では，r を不変のまま角度 θ を $\pi-\theta$ に変えることを意味する．したがって，波動関数の漸近形は，(12.13)のかわりに，

$$e^{ikz}\pm e^{-ikz}+[f(\theta)\pm f(\pi-\theta)]\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (r\to\infty) \tag{12.86}$$

のように書かなければならない．この問題について一般的に論ずるかわりに，典型的な例を 3 つほどあげて説明することにしよう．

例 1　α 粒子—α 粒子散乱

α 粒子のスピンはゼロなので，Bose 統計に従う 2 つの α 粒子の間のポテンシャルはスピンに依存しない．さて，弾性散乱の場合，同種粒子の間では，図 12.8 (a)と(b)のように原理的に区別することのできない 2 つの過程がある．すなわち，図 12.8 の検出器で検出する α 粒子は(a)のタイプのものか，(b)のタイプのものか，量子力学では原理的に区別がつかない．そのような場合には，(a)と(b)の散乱振幅の和が全体の散乱振幅になっている．この結果，微分断面積は，

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$$

$$=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)] \tag{12.87}$$

となる．上式右辺の第 1，2 項は，古典論のように粒子が識別可能であるとしたときの(a)，(b)の和に相当する．第 3 項は，2 つの粒子の同等性の効果であり，量子力学が正しいことの実験的検証を与える．たとえば，$\theta=90°=\pi/2$ での散乱を考えてみよ

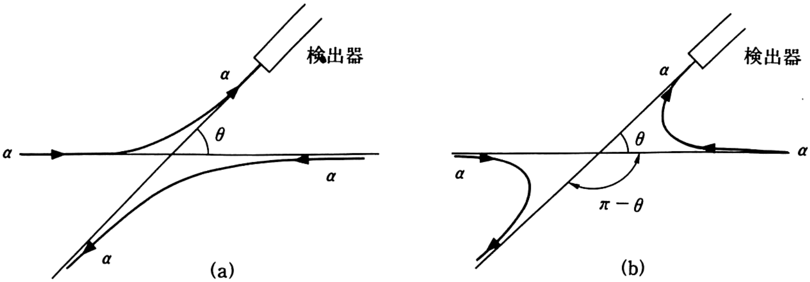


図 12.8 α-α 散乱

う．そのときには，

$$f(\theta)=f(\pi-\theta)=f\left(\frac{\pi}{2}\right) \tag{12.88}$$

となる．粒子が識別可能なときには，

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\frac{\pi}{2}}=2\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \tag{12.89}$$

となるが，識別可能でないときには，

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\frac{\pi}{2}}=4\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \tag{12.90}$$

となる．この粒子の同等性の効果(12.90)は実験的にもよく検証されている．全断面積を求めるには，(12.87)を全立体角について積分すればよいが，同じ状態について 2 回ずつ数えたことになるので 2 で割って，

$$\sigma_{\text{tot}}=\frac{1}{2}\int_{4\pi}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 d\Omega \tag{12.91}$$

となる．当然，量子力学では，$\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$ は $\theta=90°$ を境に(重心系で)，前後対称になっている．

例 2　陽子—陽子散乱

陽子—陽子系の合成スピンは 0 または 1 であり，ポテンシャルはスピンに依存するので，スピン一重状態(三重状態)の散乱振幅を $f^{\mathrm{s}}(f^{\mathrm{t}})$ としよう．スピンの一重状態は粒子の交換に対し反対称なので，空間部分は対称，$f^{\mathrm{s}}(\theta)+f^{\mathrm{s}}(\pi-\theta)$，スピンの三重状態は入れかえに対して対称なので，空間部分は反対称，$f^{\mathrm{t}}(\theta)-f^{\mathrm{t}}(\pi-\theta)$ でなければならない．

もし入射粒子線が偏極していないとすると，スピン一重状態には 1/4 の，スピン

三重状態には3/4の統計的重みがかかるので,

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\text{unpol.}}=\frac{1}{4}|f^{\text{s}}(\theta)+f^{\text{s}}(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f^{\text{t}}(\theta)-f^{\text{t}}(\pi-\theta)|^2 \tag{12.92}$$

となる. 全断面積を得るため, (12.92)を全立体角について積分すると, やはり同じ状態について2回ずつ数えたことになるから,

$$\sigma_{\text{tot}}=\frac{1}{2}\int_{4\pi}\left[\frac{1}{4}|f^{\text{s}}(\theta)+f^{\text{s}}(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f^{\text{t}}(\theta)-f^{\text{t}}(\pi-\theta)|^2\right]d\Omega \tag{12.93}$$

となる.

例3 電子—電子散乱

この場合には, ポテンシャルはスピンに依存せず, Coulombポテンシャルで表されるものとする. 基本的な考えは, 例2と同じであるが, 12.7節より,

$$f_{\text{C}}{}^{\text{s}}(\theta)=f_{\text{C}}{}^{\text{t}}(\theta)=f_{\text{C}}(\theta)=\frac{\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]}{2ik\sin^2\frac{\theta}{2}}\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}$$

$$=-\frac{e^2}{m_{\text{e}}v^2\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \tag{12.94a}$$

$$f_{\text{C}}(\pi-\theta)=-\frac{e^2}{m_{\text{e}}v^2\cos^2\frac{\theta}{2}}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)\right]\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \tag{12.94b}$$

(12.92), (12.94)より,

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\text{unpol.}}=\frac{1}{4}|f_{\text{C}}(\theta)+f_{\text{C}}(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f_{\text{C}}(\theta)-f_{\text{C}}(\pi-\theta)|^2$$

$$=|f_{\text{C}}(\theta)|^2+|f_{\text{C}}(\pi-\theta)|^2-\text{Re}f_{\text{C}}{}^*(\theta)f_{\text{C}}(\pi-\theta)$$

$$=\left(\frac{e^2}{m_{\text{e}}v^2}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}+\frac{1}{\cos^4\frac{\theta}{2}}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\ln\tan^2\frac{\theta}{2}\right)\right] \tag{12.95}$$

となる.

12.9 Lippmann-Schwinger 方程式 — 散乱理論の形式論

12.3節で散乱問題を取り扱ったときは, Schrödinger方程式(12.7)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r)\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r})$$

の定常解を求め，時間に依存しない形で議論した．この節では，まとめとして散乱問題の記号的解法を解説しておこう．

いま，ハミルトニアンが，

$$\hat{H}=\hat{H}_0+V \tag{12.96}$$

で与えられたとしよう．ここで，$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta$. $|\varphi^{(0)}\rangle$ を $\hat{H}_0$ の固有ケット・ベクトルとすると，

$$\hat{H}_0|\varphi^{(0)}\rangle=E|\varphi^{(0)}\rangle \tag{12.97}$$

V の存在により，エネルギー固有状態は自由粒子状態から異なってくる．しかし，散乱が弾性的であるとするとエネルギーの変化はない．したがって，われわれの解くべき問題は，(12.97)と同じエネルギー固有値をもつ全ハミルトニアンに対する

$$(\hat{H}_0+V)|\varphi\rangle=E|\varphi\rangle \tag{12.98}$$

の解を求めることである．ここで考えるべき解は $V\to0$ のとき，$|\varphi\rangle\to|\varphi^{(0)}\rangle$ にもどらねばならないから，

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(\pm)}\rangle \tag{12.99}$$

で与えられる．これがLippmann-Schwinger 方程式とよばれるものである．

例題 1

$$\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle=\frac{2\mu}{\hbar^2}G_\pm(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad ①$$

が成り立つことを証明せよ．

解

$$\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle=\int d^3p'\int d^3p''\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}'\rangle\langle\boldsymbol{p}'|\frac{1}{E-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2\mu}\pm i\varepsilon}|\boldsymbol{p}''\rangle\langle\boldsymbol{p}''|\boldsymbol{r}'\rangle$$

$$=\int d^3p'\int d^3p''\frac{\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}}{\hbar}\right)}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')}{E-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2\mu}\pm i\varepsilon}\frac{\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}''\boldsymbol{r}'}{\hbar}\right)}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

$$=\int\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\exp\left[\frac{i\boldsymbol{p}'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{\hbar}\right]}{\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}-\frac{p'^2}{2\mu}\pm i\varepsilon}$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\frac{\exp[i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right] \qquad ⓐ$$

(12.28)を使うと,

$$ⓐ\text{式の右辺}=\frac{2\mu}{\hbar^2}G_\pm(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad ⓑ$$

よって①の関係式が証明できた．それゆえ，$\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle$ は$\left(\begin{matrix}\text{外向き}\\\text{内向き}\end{matrix}\right)$の球面波を表す． ∎

例題 2 (12.99)のうち,

$$|\varphi^{(+)}\rangle=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}V|\varphi^{(+)}\rangle \qquad ①$$

は12.3節の(12.29)と同等であることを証明せよ．

解 ①に左から$\langle\boldsymbol{r}|$をかけると,

$$\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(+)}\rangle=\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle$$
$$+\int d^3r'\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|V|\varphi^{(+)}\rangle \qquad ⓐ$$

V が $\boldsymbol{r}$-表示で対角的，すなわち,

$$\langle\boldsymbol{r}'|V|\boldsymbol{r}''\rangle=V(\boldsymbol{r}')\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \qquad ⓑ$$

であるとすると,

$$\langle\boldsymbol{r}'|V|\varphi^{(+)}\rangle=\int d^3r''\langle\boldsymbol{r}'|V|\boldsymbol{r}''\rangle\langle\boldsymbol{r}''|\varphi^{(+)}\rangle$$
$$=V(\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'|\varphi^{(+)}\rangle \qquad ⓒ$$

が得られる．それゆえ，ⓒと前の例題の①をⓐに代入すると,

$$\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(+)}\rangle=\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle+\int d^3r'\frac{2\mu}{\hbar^2}G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'|\varphi^{(+)}\rangle$$

$$=\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle+\int d^3r'G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'|\varphi^{(+)}\rangle \qquad ⓓ$$

$\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle$ は入射波 e^{ikz}，$\langle\boldsymbol{r}|\varphi^{(+)}\rangle=\varphi^{(+)}(\boldsymbol{r})$ であるから，中心力ポテンシャルの場合には，(12.29)に一致する． ∎

[問題 8] (12.99)の形式解は,

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle \qquad ①$$

と表されることを示せ,

[解] 任意の必ずしも可換でない演算子A，Bに対して，

$$\frac{1}{A}-\frac{1}{B}=\frac{1}{B}[B-A]\frac{1}{A}$$

が成り立つ．いま，$A=E-\hat{H}\pm i\varepsilon$，$B=E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon$ とおくと，

$$\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}-\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}=\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon} \qquad ⓐ$$

いま，①を

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle=\left(1+\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}V\right)|\varphi^{(0)}\rangle \qquad ⓑ$$

と書いて，(12.99)の両辺に代入すると，

$$(12.99)\text{の右辺}=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\left(1+\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}V\right)|\varphi^{(0)}\rangle$$

$$=\left(1+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\right)|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle$$

ⓐを用いて，

$$=\left(1+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\right)|\varphi^{(0)}\rangle+\left(\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}-\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}\right)V|\varphi^{(0)}\rangle$$

$$=\left(1+\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}V\right)|\varphi^{(0)}\rangle \qquad ⓒ$$

$=$ⓑ

∴ (12.99)の左辺に等しいことが導けた． ∎

[問題 9] Lippmann-Schwinger 方程式の形式解（[問題 8] の①）より，

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle$$

$$+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle+\cdots$$

という逐次近似の展開が得られることを示せ．

[解] [問題 8] のⓐより，

$$\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}=\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}\pm i\varepsilon}$$

$$=\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}$$

$$+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}+\cdots$$

この展開を [問題 8] の①に代入すると，

$$|\varphi^{(\pm)}\rangle=|\varphi^{(0)}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle$$
$$+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}V|\varphi^{(0)}\rangle+\cdots$$

が得られた．

左から $\langle \boldsymbol{r}|$ をかけると，

$$\langle \boldsymbol{r}|\varphi^{(\pm)}\rangle=\langle \boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle+\int d^3r'\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|V|\varphi^{(0)}\rangle+\cdots$$
$$=\langle \boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle+\int d^3r'\frac{2\mu}{\hbar^2}G_\pm(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\langle \boldsymbol{r}'|\varphi^{(0)}\rangle+\cdots$$

$\langle \boldsymbol{r}|\varphi^{(\pm)}\rangle=\varphi^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$, $\langle \boldsymbol{r}|\varphi^{(0)}\rangle=\varphi^{(0)}(\boldsymbol{r})=e^{ikz}$ であるから，(12.29) と同等の逐次近似の式が得られたことになる． ▮

第12章 章 末 問 題

[1] 水素原子による高速電子の Coulomb 散乱を Born 近似で考えよう．

(1) 水素原子中の陽子を点電荷とした場合の微分断面積 $\left(\dfrac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}\right)_{\mathrm{pt}}$ を求めよ．

(2) 水素原子の電荷分布を考慮した場合は，

$$\frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}\right)_{\mathrm{pt}}|F(K)|^2$$

と書けることを示せ．

ただし，$F(K)$ は電荷分布の Fourier 変換である．

[解] (1) $V(r)=-\dfrac{e^2}{r}e^{-\alpha r}$ のときの Born 近似での散乱振幅は，

$$f^{(\mathrm{B})}(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}V(r)d^3r$$
$$=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)r\frac{\sin Kr}{K}dr$$
$$=\frac{2me^2}{\hbar^2K}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin Kr dr$$
$$=\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2+K^2} \qquad ⓐ$$

$V(r)=-\dfrac{e^2}{r}$ のときは，$\alpha\to 0$ とおいて，

$$f^{(\mathrm{B})}=\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{K^2} \qquad ⓑ$$

$$\therefore \quad \left(\frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}\right)_{\mathrm{pt}}=|f^{(\mathrm{B})}|^2=\frac{4m^2e^4}{\hbar^4}\frac{1}{K^4}$$

$$=\frac{m^2e^4}{4\hbar^4k^4\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \quad ⓒ$$

(2) 電荷分布が $\rho(r)$ の場合には，$V(r)=\displaystyle\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\rho(\boldsymbol{r}')d^3r'$

$$\therefore \quad \int e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}V(r)d^3r$$

$$=\int e^{-i\boldsymbol{K}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\int e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'}\rho(\boldsymbol{r}')d^3r'd^3r$$

$$=\int e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}\frac{1}{R}d^3R\,F(\boldsymbol{K}) \quad ⓓ$$

ここで，$\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{R}$ とおいた．したがって，次式が得られる．

$$\frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma^{(\mathrm{B})}}{d\Omega}\right)_{\mathrm{pt}}|F(K)|^2$$

[2] 3次元の斥力型 δ 殻ポテンシャル $V(r)=\dfrac{\hbar^2\gamma}{2m}\delta(r-a)$ $(\gamma>0)$ による散乱を考えよう．

(1) s-波の位相のずれ $\delta_0(k)$ を求めよ．

(2) $\gamma\gg k$，$1/a$，かつ $\sin ka$ が小さくない場合の位相差を議論せよ．

[解] (1) s-波の Schrödinger 方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}+\frac{\hbar^2\gamma}{2m}\delta(r-a)\chi_0(r)=E\chi_0(r)$$

$$\therefore \quad \frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}+[k^2-\gamma\delta(r-a)]\chi_0(r)=0 \quad ⓐ$$

$V(r)=0$ $(r\neq a)$ より，$r=0$ で正則で $r=a$ で接続される解を求めよう．

(i) $r<a$ における解；$\chi_0(r)=A\sin kr$

(ii) $r>a$ における解；$\chi_0(r)=B\sin(kr+\delta_0)$

$r=a$ で波動関数は連続だから，

$$B\sin(ka+\delta_0)=A\sin ka \quad ⓑ$$

ⓐを $(a-\varepsilon, a+\varepsilon)$ で積分することにより，

$$\chi_0'(a+\varepsilon)-\chi_0'(a-\varepsilon)=\gamma\chi_0(a)$$

$$\therefore \quad B\cos(ka+\delta_0)-A\cos(ka)=\frac{\gamma}{k}A\sin(ka) \quad ⓒ$$

ⓑ，ⓒの連立方程式を $\sin\delta_0$，$\cos\delta_0$ について解くと，

$$\cot\delta_0(k)=-\frac{k}{\gamma}\frac{1}{\sin^2 ka}-\frac{\cos ka}{\sin ka} \tag{ⓓ}$$

(2) $\sin ka$ が小さくなく，$\gamma\gg k$ の場合，ⓓより，

$$\delta_0(k)\simeq -ka$$

となり，剛体球散乱と同じ結果を与える．

[3] 前問のポテンシャルによる s-波散乱における共鳴状態を調べよう．

(1) 共鳴状態の存在する条件を求めよ．また，共鳴状態のエネルギーを求めよ．

(2) 共鳴幅 Γ を求めよ．γ が大きくなるとき，どうなるか議論せよ．

(3) 入射粒子の速度が小さいとき，散乱断面積を求めよ．

[解] (1) 前問ⓓにおいて $ka=\rho$ とおくと，

$$\cot\delta_0=-\frac{\rho}{\gamma a}\frac{1}{\sin^2\rho}-\frac{\cos\rho}{\sin\rho}$$

$$=-\frac{1}{2}\frac{1}{\sin^2\rho}\left(\sin 2\rho+\frac{2\rho}{\gamma a}\right) \tag{ⓐ}$$

共鳴状態の存在する条件は，$\cot\delta_0=0$，かつ $\cot\delta_0$ が正の側から負の側にゼロを通過する場合であるから，

$$\sin 2\rho+\frac{2\rho}{\gamma a}=0 \tag{ⓑ}$$

$$\rho\simeq n\pi$$

すなわち，$\rho\simeq\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi$ でも $\cot\delta_0=0$ となるが，$\cot\delta_0$ が負の側からゼロを切るので，共鳴の条件をみたしていない．$\rho=\pi-\varepsilon$ とおいて，$\rho\simeq\pi$ の共鳴状態のエネルギーを求めると，

$$\frac{2\rho}{\gamma a}=-\sin 2(\pi-\varepsilon)\simeq 2\varepsilon,\qquad \therefore\quad \varepsilon=\frac{\pi}{\gamma a}$$

$$\therefore\quad \rho=\pi\left(1-\frac{1}{\gamma a}\right) \tag{ⓒ}$$

ゆえに，共鳴エネルギーは，

$$E_{\mathrm{R}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{\gamma a}\right) \tag{ⓓ}$$

(2) 共鳴幅 Γ は $\dfrac{d}{dE}\cot\delta_0\big|_{E=E_{\mathrm{R}}}=-\dfrac{2}{\Gamma}$ とすると，ⓐより，

$$\frac{d}{dE}\cot\delta_0=\frac{\dfrac{d}{d\rho}\cot\delta_0}{\dfrac{dE}{d\rho}} \tag{ⓔ}$$

$$E=\frac{\hbar^2\rho^2}{2ma^2}\text{ であるから，}\frac{dE}{d\rho}=\frac{\hbar^2\rho}{ma^2} \tag{f}$$

ⓐを微分して，

$$\frac{d}{d\rho}\cot\delta_0=-\frac{1}{\sin^2\rho}\left[\cos 2\rho+\frac{1}{\gamma a}\right] \tag{g}$$

ⓕ，ⓖをⓔに代入することにより，

$$\frac{2}{\Gamma}=\frac{1}{\sin^2\rho}\left[\cos 2\rho+\frac{1}{\gamma a}\right]\cdot\left[\frac{\hbar^2\pi}{ma^2}\right]^{-1}$$

$$\simeq\left[\left(\frac{\pi}{\gamma a}\right)^2\frac{\hbar^2\pi}{ma^2}\right]^{-1}$$

ここで，$\cos 2\rho=\cos\left(2\pi-\frac{2\pi}{\gamma a}\right)\approx O(1)$

$\sin^2\rho=\sin^2\left(\pi-\frac{\pi}{\gamma a}\right)=\sin^2\frac{\pi}{\gamma a}\sim\left(\frac{\pi}{\gamma a}\right)^2$

であることを用いた．

$$\therefore\quad \frac{\Gamma}{2}=\frac{\hbar^2\pi}{ma^2}\left(\frac{\pi}{\gamma a}\right)^2=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi^3}{\gamma^2 a^4} \tag{h}$$

が得られる．$\gamma\to$ 大となるとき，幅 Γ は小さくなり，ピークは鋭くなる．これは斥力型 δ 殻ポテンシャルが高くなると，球殻のなかにできた共鳴状態が崩壊しにくくなるからである．

(3)　s-波のみを考えればよい．(12.73)より，

$$f_0(k)=-\frac{\frac{\Gamma}{2}}{k\left[E-E_R+\frac{i\Gamma}{2}\right]}$$

$$\therefore\quad \sigma=4\pi|f_0|^2=4\pi\frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E-E_R)^2+\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\frac{\left[\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\left(\frac{\pi}{\gamma a}\right)^2\right]^2}{(E-E_R)^2+\left[\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\left(\frac{\pi}{\gamma a}\right)^2\right]^2}$$

と求められる．ここでⓗを用いた．また，E_R はⓓで与えられている．

[4]　束縛状態のエネルギーと，散乱の S 行列［(12.60)参照］の極とは密接な関係をもっている．これをみるために，引力の井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & (r<a)\\ 0 & (r>a)\end{cases}$$

を考えよう.

(1) まず，s-波の束縛状態のエネルギーを決める式を求めよ.

(2) つぎに，S 行列を $S=\exp(2i\delta_0)=\dfrac{\exp(i\delta_0)}{\exp(-i\delta_0)}$ とおき，分母のゼロ点と比較せよ.

このような対応がなぜ可能かについて説明せよ.

[解] (1) 束縛状態の波動関数は，s-波に対して，

$$\chi_0(r)=rR_0(r)=\begin{cases} Ae^{-\rho r} & (r>a) \quad \text{ⓐ} \\ B\sin\alpha\gamma & (r<a) \quad \text{ⓑ} \end{cases}$$

ただし，$\alpha^2=\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$，$\rho^2=-\dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

$r=a$ で，ⓐ，ⓑの対数微分が等しいとおくと，

$$\alpha\cot\alpha a+\rho=0 \qquad \text{ⓒ}$$

これが s-波の束縛状態のエネルギーを決める式である.

(2) 散乱のほうは，$k=\left(\dfrac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ とおき，δ_0 を位相のずれとして，

$$\chi_0(r)=\begin{cases} A\sin(kr+\delta_0) & (r>a) \quad \text{ⓓ} \\ B\sin\alpha r & (r<a) \quad \text{ⓔ} \end{cases}$$

同じように対数微分をとり，

$$k\cot(ka+\delta_0)=\alpha\cot\alpha a \qquad \text{ⓕ}$$

これから，$S=\dfrac{\exp(i\delta_0)}{\exp(-i\delta_0)}$ を求めよう.

ⓕより，$k\dfrac{\exp(ika+i\delta_0)+\exp(-ika-i\delta_0)}{\frac{1}{i}[\exp(ika+i\delta_0)-\exp(-ika-i\delta_0)]}=\alpha\cot\alpha a$

両辺を $\exp(ika-i\delta_0)$ でわると，

$$k\frac{S+e^{-2ika}}{\frac{1}{i}(S-e^{-2ika})}=\alpha\cot\alpha a$$

$$\therefore \quad S=\frac{e^{-ika}(\alpha\cot\alpha a+ik)}{e^{ika}(\alpha\cot\alpha a-ik)}=\frac{\exp(i\delta_0)}{\exp(-i\delta_0)} \qquad \text{ⓖ}$$

を得る.

もし，粒子の運動エネルギーがポテンシャルの深さより小さいとすれば，すなわち，$-V_0<E<0$ であれば，

$$k=i\left(\frac{2m}{\hbar^2}|E|\right)^{\frac{1}{2}}=i\rho$$

で，関数 $S_0(k)$ の極，すなわち，$\exp(-i\delta_0)$ のゼロ点は，

$$\alpha\cot\alpha a+\rho=0$$

の条件から決められる．この式は(1)で求めたⓒに一致する．

その物理的意味はつぎのとおりである．s-波の波動関数は，散乱の場合，r が大きいところで，

$$\chi_0(r)\propto\exp(-i\delta_0)e^{-ikr}-\exp(i\delta_0)e^{ikr}$$

と書ける．ここで $k=i\rho$ とおくと，

$$\chi_0(r)\propto\exp(-i\delta_0)|_{k=i\rho}\,e^{\rho r}-\exp(i\delta_0)|_{k=i\rho}\,e^{-\rho r}$$

ところが，$\exp(-i\delta_0)|_{k=i\rho}=0$ なので，

$$\chi_0(r)\propto-\exp[i\delta_0(i\rho)]\,e^{-\rho r}$$

これは，束縛状態の $r\to\infty$ での波動関数である．一般に，S 行列の極は，束縛状態のエネルギーに対応している．

[5] 球対称で到達距離が有限なポテンシャル

$$V(r)=0\ (r>R),\quad V(r)\neq0\ (r<R)$$

による s-波散乱を考える．$E=\hbar^2k^2/2m$ として波動関数 $u(r)=rR(r)$ の $r>R$ での形を $v(r)$ とする．$k=0$ の場合の解を $u_0(r)$，$v_0(r)$ とするとき，次の式を証明せよ．

$$v_0(r)=1-\frac{r}{a}$$

$$k\cot\delta=-\frac{1}{a}+k^2\int_0^R[v_0(r)v(r)-u_0(r)u(r)]dr$$

$$=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}r_0k^2+O(k^3)$$

ただし，$r_0=2\int_0^R\{[v_0(r)]^2-[u_0(r)]^2\}dr$

a：散乱長，　r_0：有効到達距離

[解] s-波の解を，$r<R$ で $u_k(r)$，$r>R$ での解を $v_k(r)$ としよう．その場合，Schrödinger 方程式は，$\alpha=\dfrac{2m}{\hbar^2}V(r)$ を用いて，

$$-u_k''+\alpha u_k=k^2u_k \qquad ⓐ$$

$$-v_k''=k^2v_k \qquad ⓑ$$

ⓑより，$v_k=\dfrac{\sin(kr+\delta_0)}{\sin\delta_0}=\dfrac{1}{\sin\delta_0}(\sin kr\cos\delta_0+\cos kr\sin\delta_0)$

$$=\cos kr+\sin kr\cot\delta_0\simeq1+(k\cot\delta_0)r \qquad ⓒ$$

$$\therefore\quad\lim_{k\to0}v_k=v_0=1-\frac{r}{a} \qquad ⓓ$$

ⓐで $k=0$ の解を u_0 とすると，$-u_0''+\alpha u_0=0$

$$\therefore \quad \alpha=\frac{u_0''}{u_0} \qquad ⓔ$$

ⓐ×u_0 は，$-u_0u_k''+u_0\alpha u_k=k^2u_0u_k$

ⓔを代入すると，

$$[u_0'u_k-u_0u_k']'=k^2u_0u_k \qquad ⓕ$$

同様に，

$$[v_0'v_k-v_0v_k']'=k^2v_0v_k \qquad ⓖ$$

ⓖ−ⓕより，

$$[v_0'v_k-v_0v_k']'-[u_0'u_k-u_0u_k']'$$
$$=k^2(v_0v_k-u_0u_k)$$

両辺を積分して，

$$[v_0'v_k-v_0v_k'-u_0'u_k+u_0u_k']_0^\infty=k^2\int_0^\infty(v_0v_k-u_0u_k)dr$$

を得る．ⓒ，ⓓを用いて左辺を計算すると，

$$\frac{1}{a}+k\cot\delta_0=k^2\int_0^\infty(v_0v_k-u_0u_k)dr$$
$$=k^2\int_0^R(v_0v_k-u_0u_k)dr$$

u_k と u は同じものであり，k が小さいときには，

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}r_0k^2+O(k^3)$$

ただし，$r_0=2\int_0^R\{[v_0(r)]^2-[u_0(r)]^2\}dr$

[6] 井戸型の核子—核子間ポテンシャル(核子の質量=938 MeV)

$$V(r)=-50\ \text{MeV}\ \ (r<b)$$
$$=\quad 0 \qquad (r>b)$$

による核子—核子散乱での a および r_0 を $b=1.4$ fm と $b=1.5$ fm の場合について求め，2 つの場合の差について議論せよ．

[解] 井戸型の場合

$$u_0=A\sin k_0r\ \ (r<b),\ \ \hbar^2k_0{}^2=2mV_0 \quad (V_0：\text{ポテンシャルの深さ})$$

$$\therefore \quad k_0=1.0975\ \text{fm}^{-1}$$

$$2m=M_{\rm N}=938\ \text{MeV}$$

$$v_0=1-\frac{r}{a}$$

$r=b$ で連続とすると，

$$1-\frac{b}{a}=A\sin k_0 b \quad ⓐ$$

対数微分を等しいとおくと，

$$k_0\cot k_0 b=\frac{-\frac{1}{a}}{1-\frac{b}{a}}=\frac{1}{b-a} \quad ⓑ$$

$$\therefore \quad a=b-\frac{1}{k_0}\tan k_0 b \quad ⓒ$$

ⓐより，

$$A=-\frac{b-a}{a\sin k_0 b}=-\frac{1}{ak_0\cos k_0 b} \quad ⓓ$$

ここでⓒを用いた．

$$r_0=2\int_0^b (v_0^2-u_0^2)dr$$

$$\int_0^b v_0{}^2 dr=\int_0^b\left(1-\frac{r}{a}\right)^2 dr=\frac{a}{3}\left[\left(\frac{b}{a}-1\right)^3+1\right]$$

$$\int_0^b u_0{}^2 dr=A^2\int_0^b \sin^2 k_0 r dr$$

$$=\frac{1}{k_0{}^2 a^2\cos^2 k_0 b}\left(\frac{b}{2}-\frac{\sin 2k_0 b}{4k_0}\right) \quad ⓔ$$

ⓒより明らかなように，散乱長 a は b の変化に対して敏感にふるまうのに対して，有効到達距離 r_0 は b の変化に対して敏感ではない．たとえば，

$b=1.4$ のとき，$\int_0^b v_0{}^2 dr=1.479$，$\int_0^b u_0{}^2 dr=0.764$．

$\therefore \quad r_0=1.43$ ⓕ

$b=1.5$ のとき，$\int_0^b v_0{}^2 dr=1.34$，$\int_0^b u_0{}^2 dr=0.624$．

$\therefore \quad r_0=1.43$

(i) $a>0$ のとき，図1のようになり，(ii) $a<0$ のとき，図2のようになる．

$b=1.4$ fm のとき，$a=-25.2$ fm（図2）

この場合，引力で束縛状態なし．

$b=1.5$ fm のとき，$a=13.6$ fm（図1）

この場合，束縛状態がある．

a の符号が正になるのは，束縛状態が $V_0 b^2>\frac{\pi^2}{4m}$ であれば存在するため（$b_{cr}=$

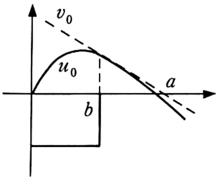


図1

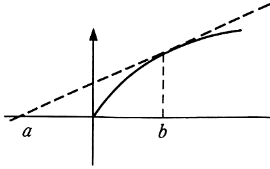


図2

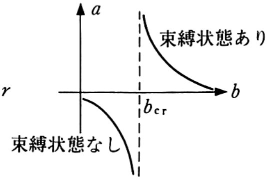


図3

1.43fm).

a の符号の変化をみると，束縛状態の生成状況がわかる．b を大きくするにつれ，a は $-\infty$ から∞へ符号を変化させる．このとき束縛状態1個が発生する(図3)．

[7] 非弾性散乱が起こる場合，波の吸収が起こり，位相のずれ δ_l は一般に複素数になる．散乱振幅を，

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \quad ①$$

と展開するとき，弾性散乱の断面積 σ_{el} および吸収の断面積 σ_{inel} はつぎのように表されることを示せ．

$$\sigma_{\mathrm{el}}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2 \quad ②$$

$$\sigma_{\mathrm{inel}}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2) \quad ③$$

[解] (i) 弾性散乱の場合

単位時間に散乱されて出てくる粒子数 N_{sc} は，散乱波 $\varphi_{\mathrm{sc}}=f\dfrac{e^{ikr}}{r}$ に対する流れの密度 j_{sc} を求め，全立体角で積分して求められる．(12.18)を参照すると，

$$j_{\mathrm{sc}}=\frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \quad ⓐ$$

$$N_{\mathrm{sc}}=\lim_{r\to\infty}\int r^2 d(\cos\theta)d\varphi j_{\mathrm{sc}}=\frac{\hbar k}{m}\int d\Omega|f(\theta)|^2$$

したがって，弾性散乱の断面積は，

$$\sigma_{\mathrm{el}}=\frac{N_{\mathrm{sc}}}{j_{\mathrm{inc}}}=\frac{N_{\mathrm{sc}}}{\dfrac{\hbar k}{m}}=\int d\Omega|f(\theta)|^2 \quad ⓑ$$

ⓑに①を代入して，Legendre の直交関係を用いると，

$$\sigma_{\rm el}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|S_l-1|^2$$

すなわち，②が得られた．

(ii) 非弾性散乱の場合

吸収される粒子数を求めるために，波動関数の球面波展開を用いて，粒子の流れの密度を求めよう．

$$\varphi^{(+)}(r,\theta)\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{i}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[(-1)^l e^{-ikr}-S_l e^{ikr}]$$

$$[\varphi^{(+)}(r,\theta)]^*\sim\frac{-i}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[(-1)^l e^{ikr}-S_l^* e^{-ikr}]$$

$j_r=\dfrac{\hbar}{2im}\left\{\varphi^*\dfrac{\partial}{\partial r}\varphi-\dfrac{\partial\varphi^*}{\partial r}\varphi\right\}$ に代入して，$P_l(\cos\theta)$ の直交性を用いると，

$$N=\lim_{r\to\infty}\int r^2 J_r\,d\Omega$$

$$=-\frac{\hbar k}{m}\sum\frac{\pi}{k^2}\{1-|S_l|^2\}(2l+1)$$

ここで，φ は内向球面波と外向球面波からなっており，j_r に対して内向波は負の寄与をし，外向波は正の寄与をすることに注意すると，それぞれの粒子数を $N_{\rm in}$，$N_{\rm out}$ として，

$$N=-N_{\rm in}+N_{\rm out}$$

一方，吸収される粒子数は，

$$N_{\rm abs}=N_{\rm in}-N_{\rm out}=-N$$

$$=\frac{\hbar k}{m}\cdot\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\{1-|S_l|^2\}$$

したがって，

$$\sigma_{\rm inel}=\frac{N_{\rm abs}}{\left(\dfrac{\hbar k}{m}\right)}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\{1-|S_l|^2\}$$

これで③が得られた．

[8] $S_l=0$ のとき，完全吸収とよぶ．半径 R の完全吸収体に粒子が衝突するとき，$\sigma_{\rm el}$，$\sigma_{\rm inel}$，および $\sigma_{\rm tot}=\sigma_{\rm el}+\sigma_{\rm inel}$ を求めよ．ただし，粒子の de Broglie 波長は半径 R に比べて十分短いものとする．

[解] 粒子の de Broglie 波長が半径に比べて小さいので，半古典的に考えよう．すなわち，粒子の衝突パラメーター $b\simeq l/k$ が R より小さい波はすべて吸収され $(S_l=0)$，$b>R$ の波は影響されない $(S_l=1)$ と考える．

前問より，

$$\sigma_{\mathrm{el}}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\{kR(kR+1)+kR\}$$

仮定により，$R/\lambda\!\!\!{}^{-}=kR\gg 1$ $\left(\lambda\!\!\!{}^{-}=\dfrac{\lambda}{2\pi}\right)$ であるから，

$$\sigma_{\mathrm{el}}=\pi R^2$$

同じく，

$$\sigma_{\mathrm{inel}}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)$$

$$=\pi R^2$$

$$\therefore\quad \sigma_{\mathrm{tot}}=\sigma_{\mathrm{el}}+\sigma_{\mathrm{inel}}=2\pi R^2$$

第13章　原子・分子・原子核・素粒子

第5章で中心力場の問題，第7章でスピンの合成，第8章で磁場中の荷電粒子，第9章で摂動論，第11章で同種粒子系の性質などを学んできたので，まず原子の世界にこれらを適用してみよう(13.1～13.6節)．重要なことは，Pauliの原理によってスピンに依存する効果が生じ，スピンが平行な電子系が低いエネルギーをもつことである．分子では，電子の感じる有効ポテンシャルがもはや球対称ではないので，原子の場合よりは複雑になる．水素分子においては，1重項状態で結合状態をつくるのに，Pauliの原理が再び重要な役割をはたすことに注意しよう(13.7節)．量子力学は，はるかに小さい原子核の世界($\sim 10^{-13}$ cm)にも適用され，原子核の魔法数(マジック・ナンバー)をも説明する(13.8節)．さらに小さい素粒子の世界にも量子力学は適用可能であることを，チャーモニウムのポテンシャル模型で解説しよう(13.9節)．本文でふれることのできなかった重要な問題は章末問題であつかうことにする．

13.1　2 電子原子 — ヘリウム原子の基底状態

第 5 章で説明したように，最も簡単な原子は電子を 1 つだけもつ水素型原子であり，厳密に解ける．第二に簡単な 2 電子原子としては，ヘリウム原子，H^- イオン，1 価にイオン化したLi^+, 2 価にイオン化したBe^{++}など多価にイオン化したヘリウム型イオンがあるが，この 2 電子Schrödinger 方程式は解析的には解けない．しかし，この系を調べることには重要な意義がある．すなわち，量子力学の基本的性質の 1 つである粒子の同等性が重要な役割をはたす現実例となっているからである．Pauli の原理によって，波動関数は 2 つの電子の入れかえに対して反対称でなければならないが，まず手はじめに，ヘリウム原子の基底状態を考えてみよう．系のハミルトニアンは，

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \left(\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}\right) + \left(\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}} \\ &= \hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2) + \hat{V}_{12} \end{aligned} \tag{13.1}$$

で与えられるとしよう．ここで，$\hat{V}_{12} = \dfrac{e^2}{r_{12}}$ は電子間相互作用の演算子である[1)]．いま，ヘリウム原子の基底状態のエネルギーを求めてみよう (図 13.1)．

例題　ヘリウム原子のハミルトニアン (13.1) において，$\hat{V}_{12}$ を無視する近似で，ヘリウム原子の

(1) 基底状態のエネルギーを求めよ．

(2) 基底状態の波動関数を求めよ．

(3) 2 電子間の Coulomb 相互作用による基底状態のエネルギー補正を 1 次の摂動で求めよ．補正後の基底状態のエネルギーを実験値と比べてみよ．

解　(1) $\hat{H}$ は $\hat{H}_0(1,2) = \hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2)$ に帰着し，基底状態の電子配置は 2 電子と

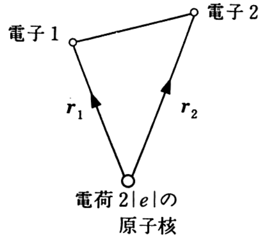


図 13.1　ヘリウム原子

1)　ここで，原子核は静止していると仮定したが，本当に厳密には，その運動も考慮に入れなければならない．

も $n=1$, $l=0$ にあり，Schrödinger 方程式は変数分離型でそのエネルギーは，

$$E_{(0)}=E_1\times 2=-\frac{(2e)^2}{2a_0}\times 2=\left(-\frac{e^2}{2a_0}\right)\times 8$$
$$=(-13.6\,\mathrm{eV})\times 8=-108.8\,\mathrm{eV} \quad ⓐ$$

(2) 2 個の電子は同等性をもつ Fermi 粒子であるから，全波動関数は 2 個の電子の座標とスピンの入れかえに対して反対称．空間部分は必然的に対称であり，スピン部分は反対称な 1 重項 χ_S のみが許される．ゆえに，基底状態の波動関数は，

$$\varphi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)\chi_S(1,2)$$
$$=\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{2r_1}{a_0}\right)\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{2r_2}{a_0}\right)\right]\chi_S(1,2)$$
$$=\frac{1}{\pi}\left(\frac{2}{a_0}\right)^3\exp\left[-\frac{2(r_1+r_2)}{a_0}\right]\chi_S(1,2) \quad ⓑ$$

(3) 1 次の摂動エネルギーは，

$$\varDelta E=\left\langle\frac{e^2}{r_{12}}\right\rangle_{(1s)^2}$$
$$=\int d^3r_1'd^3r_2'\varphi_0^*(\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2')\frac{e^2}{r_{12}'}\varphi_0(\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2')$$
$$=\int d^3r_1'd^3r_2'|\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1')|^2\frac{e^2}{r_{12}'}|\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2')|^2$$

となる．ここで，$\chi_S^*\chi_S=1$ を用いた．

$$\therefore\quad \varDelta E=\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{2}{a_0}\right)^6 e^2\int d^3r_1'\int d^3r_2'\exp\left(-\frac{4r_1'}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{4r_2'}{a_0}\right)\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2'|} \quad ⓒ$$

この積分を実行するために，$\frac{4}{a_0}\boldsymbol{r}_1'=\boldsymbol{r}_1$, $\frac{4}{a_0}\boldsymbol{r}_2'=\boldsymbol{r}_2$ と変数変換をすると，

$$I\equiv\int d^3r_1'\int d^3r_2'\exp\left(-\frac{4r_1'}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{4r_2'}{a_0}\right)\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2'|}$$
$$=\left(\frac{a_0}{4}\right)^5\int d^3r_1\int d^3r_2 e^{-r_1}e^{-r_2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} \quad ⓓ$$

を得る．まず，$\int d^3r_2 e^{-r_2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=f(\boldsymbol{r}_1)=f(r_1)$ の積分を求めるため，両辺のラプラシアンをとってみると，

$$-4\pi\int d^3r_2 e^{-r_2}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)=\Delta f(r_1)=\frac{1}{r_1}\frac{d^2}{dr_1^2}[r_1 f(r_1)].$$
$$\therefore\quad \frac{d^2}{dr_1^2}[r_1 f(r_1)]=-4\pi r_1 e^{-r_1} \quad ⓔ$$

r_1 について2回積分すると，

$$r_1 f(r_1) = -4\pi(2+r_1)e^{-r_1} + a + br_1 \tag{f}$$

ここで積分定数 a, b を決めてやるために，$f(\boldsymbol{r}_1)$ の $|\boldsymbol{r}_1| \to \infty$ でのふるまいを調べると，

$$f(\boldsymbol{r}_1) \xrightarrow[|\boldsymbol{r}_1|\to\infty]{} \frac{1}{r_1}\int_0^\infty d^3 r_2 e^{-r_2} = \frac{8\pi}{r_1} \tag{g}$$

ⓕ，ⓖより $a=8\pi$，$b=0$ が得られ，

$$f(r_1) = -4\pi\left(1+\frac{2}{r_1}\right)e^{-r_1} + \frac{8\pi}{r_1} \tag{h}$$

となる．ⓗをⓓに代入すると，

$$\begin{aligned} I &= \left(\frac{a_0}{4}\right)^5 \int d^3 r_1 f(r_1) e^{-r_1} \\ &= \left(\frac{a_0}{4}\right)^5 (4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-r_1}\left\{\frac{2}{r_1} - \left(1+\frac{2}{r_1}\right)e^{-r_1}\right\} \\ &= \left(\frac{a_0}{4}\right)^5 (4\pi)^2 \left\{2 - \frac{1}{8}\cdot 2 - \frac{1}{2}\right\} = \left(\frac{a_0}{4}\right)^5 (4\pi)^2 \frac{5}{4} \end{aligned} \tag{i}$$

となり，ⓒに代入してまとめると，

$$\begin{aligned} \varDelta E &= \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{2}{a_0}\right)^6 e^2 \left(\frac{a_0}{4}\right)^5 (4\pi)^2 \frac{5}{4} = \frac{5}{2}\left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \\ &\simeq 34\ \mathrm{eV} \end{aligned} \tag{j}$$

が得られる．この寄与 $\varDelta E$ は Coulomb 斥力からくるので正符号を与える．このずれをⓐに加えると，

$$E = E_{(0)} + \varDelta E = \left(-8+\frac{5}{2}\right)\frac{e^2}{2a_0} \simeq -74.8\ \mathrm{eV} \tag{k}$$

これを実験値 -78.8 eV と比較すると，(1)の場合よりはいい値になっていることがわかる．しかし，もっとよい計算もできる．そのためには，Z に関する変分原理を使えばよい([問題1] 参照)．■

[問題1]　ヘリウム原子のハミルトニアンが，(13.1)で与えられているとしよう．基底状態では，2電子の軌道角運動量はゼロで，スピンが反平行の状態にある．したがって，Ze の電荷をもつ核のまわりの水素型波動関数の2つの積

$$\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \exp\left[-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}\right] \tag{1}$$

を規格化された試行関数として採用することにしよう．この場合，変分法を用いてヘリウム原子の基底状態のエネルギーを計算し，実験値と比べて物理的意味を議論せよ．

[解]　試行関数 $\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ と(13.1)で与えられたハミルトニアン $\hat{H}$ を用いて，エネルギー

$$E(Z)=\int\varphi_Z{}^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\hat{H}\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \qquad ⓐ$$

を計算し，極小の条件 $\dfrac{d}{dZ}E(Z)=0$ から系の基底状態のエネルギーを計算しよう．ⓐの積分は，つぎの3項の和の形

$$E(Z)=E_1(Z)+E_2(Z)+E_3(Z), \qquad ⓑ$$

ここで，

$$E_1(Z)=\int\varphi_Z{}^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\left(\frac{\boldsymbol{p}_1{}^2}{2m}+\frac{\boldsymbol{p}_2{}^2}{2m}\right)\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$E_2(Z)=-\int\varphi_Z{}^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\left(\frac{2e^2}{r_1}+\frac{2e^2}{r_2}\right)\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$E_3(Z)=\int\varphi_Z{}^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

と表すことができる．

例題のⓒの積分において，$2\to Z$ でおきかえれば $E_3(Z)$ が得られる．$\dfrac{2Z}{a_0}\boldsymbol{r}_1{}'=\boldsymbol{r}_1$，$\dfrac{2Z}{a_0}\boldsymbol{r}_2{}'=\boldsymbol{r}_2$ とおけば，ⓓの積分 $I\to\left(\dfrac{a_0}{2Z}\right)^5(4\pi)^2\dfrac{5}{4}$

$$\therefore\quad \varDelta E\to\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6e^2\left(\frac{a_0}{2Z}\right)^5(4\pi)^2\frac{5}{4}=\frac{5Ze^2}{8a_0}$$

が得られる．

$$\therefore\quad E_3(Z)=\frac{5Ze^2}{8a_0}$$

$E_2(Z)$ に関しては，

$$\begin{aligned}E_2(Z)&=-\frac{2}{Z}\int\varphi_Z{}^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\left(\frac{Ze^2}{r_1}+\frac{Ze^2}{r_2}\right)\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2\\&=\frac{2}{Z}\left(-\frac{Z^2e^2}{a_0}\right)\times2\\&=-\frac{4Ze^2}{a_0}\end{aligned}$$

$E_1(Z)$ に関しては，$\boldsymbol{p}_1{}^2=-\hbar^2\nabla_1{}^2=-\hbar^2\left(\dfrac{d^2}{dr_1{}^2}+\dfrac{2}{r_1}\dfrac{d}{dr_1}\right)$，$\boldsymbol{p}_2{}^2=-\hbar^2\left(\dfrac{d^2}{dr_2{}^2}+\dfrac{2}{r_2}\dfrac{d}{dr_2}\right)$ を $\varphi_Z(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ に演算子として作用させるとき $(Z/a_0)^2$ がでることより，$E_1(Z)=\dfrac{Z^2e^2}{2a_0}\times2$．

したがって,

$$E(Z)=\left(Z^2-4Z+\frac{5Z}{8}\right)\frac{e^2}{a_0} \qquad \text{ⓒ}$$

になる. $E(Z)$ を最小にする Z は $\frac{d}{dZ}E(Z)=0$ より, $Z=27/16=1.6875$ で, このときのエネルギーが,

$$E=-\frac{729}{256}(2\times 13.6\,\text{eV})=-77.5\,\text{eV} \qquad \text{ⓓ}$$

となる. ゆえに, 1次の摂動による値, -74.8 eV (例題のⓚ) より実測値, -78.8 eV に近いことがわかる.

物理的には, 一方の電子が感じる有効な Z が2より小さくなっていることになり, 他方の電子の負の帯電した雲がヘリウム核の $Z=2$ の正電荷を部分的に遮蔽するという事実を考慮していることになる. ▮

13.2 ヘリウム原子の励起状態

第ゼロ近似で, ヘリウムの基底状態には, 2個の電子が水素型原子の $1s$ 状態にあった. この状態を簡単に $(1s)^2$ を記すことにしよう. ヘリウムの第1励起状態では, 1つの電子が $1s$ 状態に, 他の電子が $2s$ 状態にあるので $(1s)(2s)$ というものに相当する. 電子の同等性に由来する量子力学的効果を説明する見地からすると, この問題はとてもおもしろい. そこで, つぎの例題を考えてみよう.

例題 1 ヘリウム原子のハミルトニアン(13.1)の $\hat{V}_{12}$ を無視する近似で, ヘリウム原子の

(1) 第1励起状態のエネルギーを求めよ.

(2) スピン状態を考慮して, 第1励起状態の波動関数を求めよ.

解 (1) 1つの電子が $n=1$ の基底状態に, 他の電子が $n=2$ の第1励起状態にあるので,

$$E=E_1+E_2=-\frac{2^2e^2}{2a_0}-\frac{2^2e^2}{2a_0}\frac{1}{2^2}=\left(-\frac{e^2}{2a_0}\right)\times 5$$
$$=-68.0\,\text{eV} \qquad \text{ⓐ}$$

(2) 全波動関数は2個の電子の座標とスピンの入れかえに対して反対称でなければならない. スピン状態にはスピン1重項, スピン3重項の2つの場合がある. 前者 $\chi_S(1,2)$ は2粒子の入れかえに対して反対称なので, 空間部分に関しては対称でなければならない. したがって,

$$\varphi_1^{(s)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{2lm}(\boldsymbol{r}_2)+\varphi_{2lm}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)]\chi_s(1,2) \qquad ⓑ$$

一方，スピン3重項の場合には，$\chi_t(1,2)$ は2粒子の入れかえに対して対称なので，空間部分に関しては反対称でなければならない．ゆえに，

$$\varphi_1^{(t)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{2lm}(\boldsymbol{r}_2)-\varphi_{2lm}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)]\chi_t(1,2) \qquad ⓒ$$

ここで，$\chi_t(1,2)=\begin{cases}\alpha(1)\alpha(2)\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\ \beta(1)\beta(2)\end{cases}$

となる．　▮

例題2　ヘリウム原子のハミルトニアン(13.1)で $V_{12}\neq 0$ のとき，

(1) 電子間の Coulomb 斥力のエネルギーの期待値を摂動の1次の項まで求めよ．

(2) (1)の結果を物理的に吟味せよ．

解　(1) 摂動の1次の項 $\varDelta E_1^{(s,t)}$ は e^2/r_{12} の期待値を計算することにより得られる．エネルギーのずれは，L_z と交換する摂動によってひきおこされるので，スピン1重状態と3重状態のそれぞれで $m=0$ の状態における期待値を計算すれば十分である．

$$\begin{aligned}\therefore\quad \varDelta E_1^{(s,t)}&=\frac{1}{2}e^2\int d^3r_1\int d^3r_2[\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_2)\pm\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)]^*\\ &\qquad\times\frac{1}{r_{12}}[\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_2)\pm\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)]\\ &=J\pm K \qquad ⓐ\end{aligned}$$

J と K は，それぞれ，直接積分，交換積分とよばれ，

$$J=\int d^3r_1\int d^3r_2|\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)|^2|\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_2)|^2\frac{e^2}{r_{12}} \qquad ⓑ$$

$$K=\int d^3r_1\int d^3r_2\varphi_{100}^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{2l0}^*(\boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2) \qquad ⓒ$$

で与えられる．上(下)の符号はスピン1重項(3重項)に対するものである．ⓐ式の第1項 J は Coulomb 相互作用エネルギーともよばれ，$e|\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)|^2$ と $e|\varphi_{2l0}(\boldsymbol{r}_2)|^2$ の電荷密度をもつ2つの雲の間の静電相互作用という見慣れた形をもっている．第2項 K は交換相互作用エネルギーとよばれ古典的な解釈はできない．明らかに J は正の値をとり，またKも正の値をとることが示せる．そこで最終的には，スピン3重項状態がスピン1重項状態よりも低いエネルギーをとる．

(2) なぜスピンの大きい3重項の場合，低いエネルギーをとるかという理由は，つ

ぎのように物理的に解釈できよう．例題 1 の(2)で示したように，スピン 3 重項の場合には，空間部分の波動関数は $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$ の入れかえに対して反対称．したがって，この関数は $\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2$ においてゼロとなる．いいかえれば，$S=1$ の状態では 2 つの電子がたがいに避けあう傾向をもつ．このため，電気的反発力は弱くなるのでエネルギーも低くなる(図 13.2 参照)と解釈できる．　▮

例題 2 で説明したように，3 重項状態は 1 重項状態よりエネルギーが低い．これは **Hund の第 1 法則**として知られている法則の特別の場合である．**Hund の第 1 法則**とは，

いくつかの電子が同一の殻を占める場合に可能な多重項のうちで，最大のスピンをもつ状態がもっともエネルギーが低い．

という経験則であり，これは Fermi-Dirac 統計に由来する．スピン 1 重項状態のヘリウムは**パラ-ヘリウム**とよばれ，スピン 3 重項状態のヘリウムは**オルソ-ヘリウム**とよばれている．(13.1)に示したように，ポテンシャルは単に 3 つの Coulomb 項の和であり，ハミルトニアンにはまったくスピン依存性はなかった．しかし，重要なことは，統計性の結果スピンに依存する効果が生じ，スピンが平行な電子が低いエネルギーをもつことである．図 13.3 にヘリウムの第 1 励起状態のエネルギー準位の

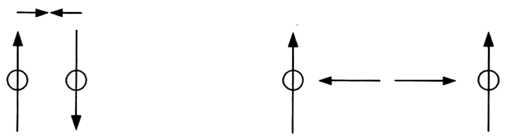


図 13.2　2 電子のスピンが平行のとき (3 重項)，エネルギーが低くなることを示す概念図

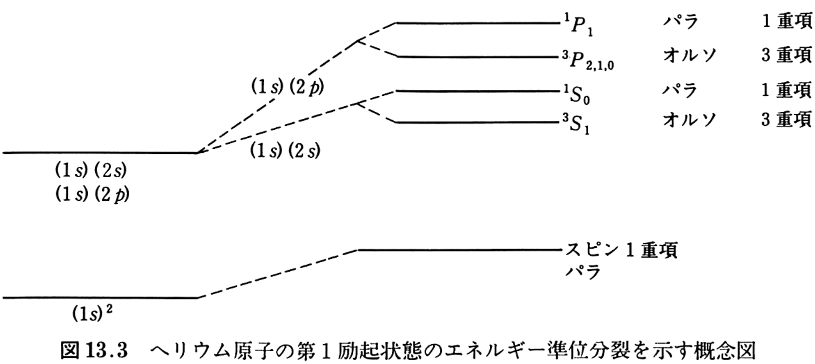


図 13.3　ヘリウム原子の第 1 励起状態のエネルギー準位分裂を示す概念図

分裂のようすを示しておこう.

13.3 多電子原子

中心力場の近似

もっとも軽い2つの原子, すなわち, 水素とヘリウムについてはそれぞれ, 5.7節と前の2つの節とで調べておいた. しかし, 多電子原子では, それぞれの電子が原子核からのCoulomb引力のほかに自分以外の電子からのCoulomb斥力を受ける. したがって, 1つの電子の状態を求める問題は多体問題になってしまって厳密解は得られない. そこで, 着目する1つの電子が原子核と自分以外の電子によってつくられる球対称ポテンシャルのなかで運動していると仮定すれば1体問題に帰着する. この近似を**中心力場の近似**とよぶ.

このような球対称の場のなかでは, 電子の状態は4つの量子数 n, l, m, m_{s} によって指定される. $m_{\mathrm{s}}=\pm 1/2$ はスピンの向きを指定し, n は水素原子のときに現れた主量子数の自然な一般化になっている. $n=1$ のときには, $l=0$ のみが許されるから $(1s)$ で, $m_{\mathrm{s}}=\pm 1/2$ の値をとり得るから2重に縮退している. したがって, $1s$ 状態には2個の電子を収容できる. $n=2$ のときは, $l=0$ の $2s$ 状態が $m_{\mathrm{s}}=\pm 1/2$ の値をとることができ, 2重に縮退しているので, やはり2個の電子を収容できる. $l=1$ の $2p$ 状態では, $m=+1, 0, -1$, そのおのおのに対して $m_{\mathrm{s}}=\pm 1/2$ が許されるので, 6個の電子を収容できる.

m と m_{s} に対する縮退のため, $2(2l+1)$ だけの電子は同じエネルギーをもつことになる. これらの電子は n と l で指定される1つの**殻**をつくるといわれる. 分光学の慣用の記法によれば, 殻の n の値は数字で表し, l の値はつぎのように対応する文字で表す.

$$
\begin{array}{ccccccc}
l=0, & 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & \cdots \\
s, & p, & d, & f, & g, & h, & \cdots
\end{array}
$$

各殻中の電子の最大数は $2(2l+1)=2, 6, 10, 14, 18, 22, \cdots$ となる. 殻中の電子の数は, $(1s)^2$, $(2p)^6$ のように上につけた数字の添字で表す.

元素の周期律

原子の基底状態では, Pauliの原理にしたがって電子は低いエネルギー状態から順番につまってゆく. ポテンシャルが $1/r$ のときには, n の値によってエネルギー準位は決まっているが, 遮蔽の効果によって事情が微妙に変わってくる. すなわち, n の値が同じでも l の値によってエネルギー準位が変わってくる. たとえば, $n=3$ の場合を考えてみよう. s 軌道の電子の電荷は r が小さい領域に集中しているので, 原子核からの引力をまともに受ける. これに反して p 軌道の電子は, 遠心力障壁に

より外に押し出される．一方，s 軌道の電子に遮蔽されて，原子核からの引力は減ってくる．ゆえに，p 電子のエネルギー準位は少し高くなる．d 電子が原子核から感じる引力はさらに減ることになる．

そのため $4s$ 状態のエネルギーは，$3d$ 状態のエネルギーより小さくなり，$5s$ 状態は $4d$ 状態よりもエネルギーが低くなる．したがって，原子中の電子のエネルギー状態の観測される順序は，エネルギーの小さいほうから順に示すと，つぎのようになる．

	$1s$,	$2s$,	$2p$,	$3s$,	$3p$,	$[4s$,	$3d]$,	$4p$,	$[5s$,	$4d]$,	$5p$,	$[6s$,	$4f$,	$5d]$,	…
$n+l$	1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7 ,	…

経験によると，$n+l$ の順にエネルギー準位が並び，$n+l$ の同じうちでは，n の小さいほうが下にある．表 13.1 に，これらのエネルギーの順序を電子の状態や殻中のすべての状態の数とともにまとめておこう．

表 13.1 を参照しながら，Pauli の原理にしたがって電子を低いエネルギーから順番につめて，表 13.2 に元素の周期律表をつくっていこう．

原子の状態を完全に記述するためには，それぞれの電子の状態のほかに原子全体の L，S，J を指定する必要があり，表 13.2 のいちばん右側の列に記しておく．

s 状態のおのおのには 2 個以下の電子しか入れないし，p 状態には 6 個以下，d 状態には 10 個以下，f 状態には 14 個以下しか入れない．**水素原子** ($Z=1$) では，電子は 1 個で基底状態は $1s$ 状態，電子の状態の分光学的記述は $^2S_{1/2}$ となる．**ヘリウム原子** ($Z=2$) では，2 個の電子が第 1 の殻をみたしていて，基底状態は $(1s)^2$．**リチウム原子** ($Z=3$) では，Pauli の原理により $(1s)^3$ は禁止され，$(1s)^2(2s)(\equiv(\mathrm{He})(2s))$ が許される．閉殻 ($^1S_0$) の外に 1 個の電子が加わるので，水素原子と同じように $^2S_{1/2}$ となる．**ベリリウム原子** ($Z=4$) では $(1s)^2(2s)^2$ で再び閉殻となり $^1S_0$．これで $n=2$，$2s$ 軌道も満員となる．**ボロン原子** ($Z=5$) では，閉殻に 5 番目の電子が $2p$ 状態で加わる．**ネオン原子** ($Z=10$) で $2p$ 殻も $(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^6$ で閉殻となり，基底状態は $^1S_0$ と

表13.1　原子中の電子の殻，電子の状態，殻中の状態の数

殻の番号	電子の状態	殻中の状態の数
1	$1s$	2
2	$2s$, $2p$	$2+6=8$
3	$3s$, $3p$	$2+6=8$
4	$4s$, $3d$, $4p$	$2+10+6=18$
5	$5s$, $4d$, $5p$	$2+10+6=18$
6	$6s$, $4f$, $5d$, $6p$	$2+14+10+6=32$

なる．

つぎは $n=3$ の殻に電子をつめなければならない．この周期では，再び 8 個の元素が繰り返し，最初に $3s$-殻が満員となり，つぎに $3p$-殻が $(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^6$ のアルゴン

表13.2 周期律表

殻の番号	Z	元素	電子の状態	$^{2s+1}L_J$
1	1	H	$(1s)$	$^2S_{1/2}$
	2	He	$(1s)^2$	$^1S_0$
2	3	Li	$(\mathrm{He})(2s)$	$^2S_{1/2}$
	4	Be	$(\mathrm{He})(2s)^2$	$^1S_0$
	5	B	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)$	$^2P_{1/2}$
	6	C	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$
	7	N	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{3/2}$
	8	O	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$
	9	F	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{3/2}$
	10	Ne	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$
3	11	Na	$(\mathrm{Ne})(3s)$	$^2S_{1/2}$
	12	Mg	$(\mathrm{Ne})(3s)^2$	$^1S_0$
	13	Al	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)$	$^2P_{1/2}$
	14	Si	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$
	15	P	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{3/2}$
	16	S	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$
	17	Cl	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{3/2}$
	18	Ar	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$
4	19	K	$(\mathrm{Ar})(4s)$	$^2S_{1/2}$
	20	Ca	$(\mathrm{Ar})(4s)^2$	$^1S_0$
	21	Sc	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)$	$^2D_{3/2}$
	22	Ti	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^2$	$^3F_2$
	23	V	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^3$	$^4F_{3/2}$
	24	Cr	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^5$	$^7S_3$
	25	Mn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^5$	$^6S_{3/2}$
	26	Fe	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^6$	$^5D_4$
	27	Co	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^7$	$^4F_{9/2}$
	28	Ni	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^8$	$^3F_4$
	29	Cu	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^{10}$	$^2S_{1/2}$
	30	Zn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	$^1S_0$
	31	Ga	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)$	$^2P_{1/2}$
	32	Ge	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$	$^3P_0$
	⋮	⋮	⋮	⋮

原子 ($Z=18$) でいっぱいとなり，$Z=11\sim18$ の周期の元素は $Z=3\sim10$ の周期の元素と似た化学的性質をもっている．ところで，10個の電子を収容できる $3d$-殻がまだみたされていないので，アルゴン原子で閉殻になるのは少し不思議だと思われるかもしれないが，これは前述したように $4s$ と $3d$ のエネルギー準位が逆転したためである．

紙数の制限もあるので，周期律表の各々の元素についての説明は省略し，一般的な性質をコメントすることにとどめておこう．

1．一般に元素の化学的性質は，閉殻の外にある電子の状態によって決まる．たとえば，He，Ne，Ar のような閉殻からなる原子では，全軌道角運動量，全スピンはゼロとなる．これらの原子は非常に安定で，他の原子とほとんど化学結合をしない(不活性ガス)．閉殻の外に1個の s 状態の電子をもった原子，たとえば，Li，Na，Kのような原子はすべて似た化学的性質をもち，アルカリ金属に属する．スペクトルは水素原子の場合によく似ている．p 電子の閉殻に1個の電子が足りない原子(たとえば，F，Cl)はハロゲン原子とよばれ，アルカリ原子といっしょになって，安定な分子をつくる(例；NaCl)．

2．原子構造で元素の数を制限する理由は何もない．$Z\gtrsim100$ の原子が自然界に存在しない理由は，重い原子核が自発的に核分裂を起こしてしまうからである．

13.4　Hartree 近似

前節で議論したように，電子の数が増してくると，1個の電子の受ける力は，原子核からの Coulomb 引力のほかに自分以外の電子からの Coulomb 斥力を受ける．Coulomb 斥力のポテンシャルを平均化して球対称のポテンシャルにおきかえ，ただ1つの電子が中心力場のなかで運動する問題になおしてやろう．

そこで，N 個の電子からなる原子の波動関数を，1電子波動関数の単なる積として，

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)=\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_N) \tag{13.2}$$

で近似し，さらに以下に示すような近似を行って，1電子波動関数を求めてみよう．

いま，i 番目の電子に着目すると，この電子が原子核から受ける Coulomb ポテンシャル $-Ze^2/r_i$ は r_i だけの関数であるが，j 番目の電子から受ける Coulomb ポテンシャル $e^2/|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|$ は，$\boldsymbol{r}_i$ のみの関数ではなく $\boldsymbol{r}_j$ にも関係している．そこで，これが $\boldsymbol{r}_i$ だけの関数になるようにするために，$e^2/|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|$ に j 番目の電子を点 $\boldsymbol{r}_j$ に見い出す確率 $|\varphi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2$ を重みとしてかけて j 番目の電子の座標について平均すると，

$$\int \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}|\varphi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2 d^3 r_j$$

となる．したがって，i 番目の電子に働くポテンシャルは，

$$V_i(\boldsymbol{r}_i)=-\frac{Ze^2}{r_i}+\sum_{j\neq i}\int \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}|\varphi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2 d^3 r_j \tag{13.3}$$

となる．ゆえに，1 つの電子に対する $\varphi_i(\boldsymbol{r}_i)$ を求める Schrödinger 方程式は，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+V_i(\boldsymbol{r}_i)\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}_i)=\varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{r}_i)$$

$$(i=1,\ 2,\ \cdots,\ N) \tag{13.4}$$

であり，これら N 個の方程式は，$\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)$，$\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)$，…，$\varphi_N(\boldsymbol{r}_N)$ を決める連立方程式で Hartree 方程式という．(13.4) を解いて得た波動関数は，それらを計算するのに用いたポテンシャルと矛盾しないようにとる必要がある．

さらに $V_i(\boldsymbol{r}_i)$ を球対称にするために，(13.3)の第 2 項を $\boldsymbol{r}_i$ の方向について平均して，

$$V_i(r_i)=\int \frac{d\Omega}{4\pi}V_i(\boldsymbol{r}_i) \tag{13.5}$$

と近似することにしよう．したがって，Hartree の方程式は，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+V_i(r_i)\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}_i)=\varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{r}_i) \tag{13.4'}$$

となる．このようにして $V_i(r_i)$ を用いれば，(13.4′)の解は動径波動関数と球面調和関数の積で表すことができる．

(13.5) [(13.3)]のポテンシャルは $\varphi_j(r_j)$ $(j\neq i)$ にも関係しているので，これを求めるのに Hartree は逐次近似の方法を利用した．はじめに，$V_i(r_i)$ を近似的に表すポテンシャル $V_i^{(1)}(r_i)$ を仮定し，これを用いて Hartree 方程式(13.4′)を解いて $\{\varphi_i^{(1)}(r_i)\}$ $(i=1,2,\cdots,N)$ を求める．つぎに，この $\{\varphi_i^{(1)}(r_i)\}$ を用いて(13.5) [(13.3)]のポテンシャルを計算し，これを $V_i^{(2)}(r_i)$ と書く．さらに $V_i^{(2)}(r_i)$ を用いてポテンシャルを計算し，$\varphi_i^{(2)}(r_i)$ を求める．これを繰り返して行い，$\{\varphi_i^{(n-1)}(r_i)\}$ と $\{\varphi_i^{(n)}(r_i)\}$ が必要な精度で一致するまで計算を繰り返す．このようにして $V_i(r_i)$ と $\{\varphi_i(r_i)\}$ を求める方法を，Hartree の**自己無撞着場**の方法という．

Hartree 近似では，全系の波動関数を(13.2)の形に仮定しているので，電子間の相関が無視されている．また，電子の入れ替えに対して反対称性をみたしていないので，Pauli の原理をみたしていない．Fock は Hartree 近似に，試行関数として N 個の 1 電子関数 φ_1，φ_2，…，φ_N からつくられる Slater 行列式を用い反対称性を考慮するとりあつかいをした．これを **Hartree-Fock の近似**という．

13.5　1電子原子(アルカリ原子)　— スピン軌道相互作用と微細構造

1電子原子(アルカリ原子)，すなわち，閉殻の外側に1個の価電子をもつ原子の原子構造を調べよう．リチウム原子，ナトリウム原子，カリウム原子などが，この部類に属している．閉殻は非常に安定なので，アルカリ原子は，球対称で遮蔽されたCoulomb ポテンシャル $V_C(r)$ のなかを1個の電子が運動するという模型を使って，きわめてよい近似でとりあつかうことができる．

スピン軌道相互作用

価電子の受ける中心力ポテンシャル $V_C(r)$ は，もはや純粋のCoulomb型ではない．閉殻をなす電子全体の L も S もゼロであるから，原子の角運動量は価電子によって決まることになる．

負に帯電した内殻の電子に遮蔽された原子核の静電ポテンシャルを $\Phi(r)$ とすると，価電子の受ける中心力ポテンシャルは，

$$V_C(r)=e\Phi(r) \tag{13.6}$$

となる．価電子のスピンと $V_C(r)$ との相互作用は，このポテンシャルによる電子の軌道運動に由来するので，**スピン軌道(L-S)相互作用**とよばれる．この相互作用の存在は，定性的にはつぎのように理解できる．いま，価電子が電荷 $|e|Z$ の原子核に対して止まっているとすれば，中心力ポテンシャル $V_C(r)$ のために電場

$$\boldsymbol{E}=-\frac{1}{e}\nabla V_C(r) \tag{13.7}$$

を受ける．しかし，この電子が原子核に対して速度 $\boldsymbol{v}$ で動いている場合には，どうなるであろうか．この電子とともに動いている座標系からみれば，原子核は $-\boldsymbol{v}$ の速度で動いているので，電子の位置に，

$$\boldsymbol{B}=-\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{E} \tag{13.8}$$

の磁場をつくる．この磁場は電子のスピン，より厳密には，電子の磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu}=(1.0011596\cdots)\times\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\simeq\frac{e}{mc}\boldsymbol{S} \tag{13.9}$$

と相互作用をするので，軌道電子のスピンと磁場(13.8)との相互作用エネルギーは，

$$-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{e\boldsymbol{S}}{mc}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{E}\right)$$

$$=-\frac{e\boldsymbol{S}}{m^2c^2}\cdot(\boldsymbol{p}\times\nabla\Phi(r))=\frac{e\boldsymbol{S}}{m^2c^2}\cdot\boldsymbol{L}\frac{1}{r}\frac{d\Phi(r)}{dr}$$

$$=\frac{1}{m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_C(r)}{dr}(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}) \tag{13.10}$$

となる.この式は符号は正しいが大きさは因子2だけ大きすぎることがわかる(これをThomas因子とよぶ).このくいちがいを正しく量子力学的に説明するには,Dirac方程式を使って相対論的にあつかわねばならないが,いまのところは,現象論的に(13.10)を2で割って

$$\hat{V}_{LS}=\frac{1}{2m^2c^2}\left[\frac{1}{r}\frac{dV_C(r)}{dr}\right]\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}=f(r)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \tag{13.11}$$

ととることにする(第15章 章末問題［2］参照).

微細構造

L*-*S 相互作用項なしの1電子原子のハミルトニアンは,

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V_C(r)=\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2}+V_C(r) \tag{13.12}$$

であるから,$\hat{H}_0$ の固有関数は,球面調和関数と動径波動関数の積として書ける.いま,***L*-*S*** 項(13.11)をつぎのように加え,

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}=\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2}+V_C(r)+f(r)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \tag{13.13}$$

1次の摂動としてあつかってみよう.

例題1　$\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$ が(13.13)のハミルトニアンと可換であることを直接計算によって示せ.

解　まず,$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ との交換関係からはじめよう.

$$\begin{aligned}[\hat{J}_z,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]&=[\hat{L}_z+\hat{S}_z,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]\\&=[\hat{L}_z,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]+[\hat{S}_z,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]\\&=[\hat{L}_z,\hat{\boldsymbol{L}}]\cdot\hat{\boldsymbol{S}}+\hat{\boldsymbol{L}}\cdot[\hat{S}_z,\hat{\boldsymbol{S}}]\\&=i\hbar(\hat{L}_y\hat{S}_x-\hat{L}_x\hat{S}_y)+i\hbar(\hat{L}_x\hat{S}_y-\hat{L}_y\hat{S}_x)\\&=0\end{aligned} \tag{a}$$

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]&=[\hat{\boldsymbol{L}}^2+2\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}+\hat{\boldsymbol{S}}^2,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}]\\&=[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{L}}]\cdot\hat{\boldsymbol{S}}+\hat{\boldsymbol{L}}\cdot[\hat{\boldsymbol{S}}^2,\hat{\boldsymbol{S}}]\\&=0\end{aligned} \tag{b}$$

したがって,$\hat{J}_z$, $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ と可換である.

ハミルトニアンの残りの部分 $\hat{H}_0$ との交換関係を考えよう.$\hat{\boldsymbol{S}}$ は空間座標に無関係だから,

$$[\hat{\boldsymbol{S}},\hat{H}_0]=0 \tag{c}$$

また,$\hat{H}_0$ は回転に対し不変な形をしているので,

$$[\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{H}_0]=0 \tag{ⓓ}$$

$\therefore$　$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$ は $\hat{H}_0$ と可換.

$\therefore$　$\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$ は $\hat{H}_0$ と可換.

したがって，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$ は全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}$ と可換である．▮

ところで，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$, $\hat{\boldsymbol{S}}^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$ は $\hat{H}_0$ と可換であるのみでなく，例題より明らかなように $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}$ とも可換である．ゆえに，$\hat{H}$ の近似的波動関数 $|n\,l\,j\rangle$ は座標表示で，

$$\varphi_{n\,l\,j}=R_{n\,l}(r)\mathscr{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m} \tag{13.14}$$

のように書ける．(13.14)は $\hat{V}_{LS}$ 項を対角化するから，1次のエネルギーのずれを得るには，単に $\hat{V}_{LS}$ の(13.14)での期待値をとればよい．

$$\begin{aligned}&E_{n\,l\,j}-E_n\\&=\langle n\,l\,j|\hat{V}_{L\,S}|n\,l\,j\rangle\\&=\langle f(r)\rangle_{n\,l}\langle l\,j|\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}|l\,j\rangle\end{aligned} \tag{13.15}$$

ここで，(13.11)を用いると，

$$\begin{aligned}\langle f(r)\rangle_{nl}&=\frac{1}{2m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}\right\rangle_{nl}\\&=\frac{1}{2m^2c^2}\int_0^\infty R_{n\,l}^*(r)\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}R_{n\,l}(r)r^2dr\end{aligned} \tag{13.16}$$

を得る．一方，$l>0$ の場合は，

$$\begin{aligned}&\langle l\,j|\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}|l\,j\rangle\\&=\frac{1}{2}\langle l\,j|(\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hat{\boldsymbol{S}}^2)|l\,j\rangle\\&=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\hbar^2\\&=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{2}\,l & \left(j=l+\dfrac{1}{2}\text{のとき}\right)\\-\dfrac{\hbar^2}{2}(l+1) & \left(j=l-\dfrac{1}{2}\text{のとき}\right)\end{cases}\end{aligned} \tag{13.17}$$

となる．等式(13.15)，(13.16)，(13.17)は Landé の間隔則とよばれている．このように **L-S** 相互作用をとり入れると，与えられた l のエネルギー状態は，$j=l\pm1/2$ の2重項に分かれる．これをエネルギー準位の**微細構造**という．

例題2　価電子が s 状態にあるとき，スピン軌道相互作用はゼロである．なぜか．

解　(13.17)より，$l=0$ のとき $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{S}}$

$$\therefore\quad \hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hat{\boldsymbol{S}}^2=\hat{\boldsymbol{J}}^2-0-\hat{\boldsymbol{S}}^2=0.$$ ▮

例題 3　水素原子の微細構造分裂の大きさの程度を評価してみよう．いま，水素原子の $n=2$, $l=1$ の状態を考える．

(1) 微細構造分裂の式を求めよ．

(2) $n=2$ での束縛状態のエネルギー E_2 の大きさとの比のオーダーを評価せよ．

解　(1) (13.15)，(13.17) より，

$$\Delta E \equiv E_{2\,1\,\frac{3}{2}} - E_{2\,1\,\frac{1}{2}} = \langle f(r)\rangle_{2\,1}\left\{\langle 1\,\tfrac{3}{2}\,|\,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\,|\,1\,\tfrac{3}{2}\rangle - \langle 1\,\tfrac{1}{2}\,|\,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\,|\,1\,\tfrac{1}{2}\rangle\right\}$$

$$= \frac{3\hbar^2}{2}\langle f(r)\rangle_{21} \qquad \text{ⓐ}$$

$$\langle f(r)\rangle_{2\,1} = \frac{1}{2m^2c^2}\int_0^\infty R_{2\,1}{}^*(r)\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(-\frac{e^2}{r}\right)R_{2\,1}(r)r^2dr$$

$$= \frac{e^2}{2m^2c^2}\int_0^\infty R_{2\,1}{}^*(r)\frac{1}{r^3}R_{2\,1}(r)r^2dr$$

5.8 節の例題 1 (152 ページ)の $R_{2\,1}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$ を用いて計算すると，

$$\int_0^\infty R_{21}{}^*(r)\frac{1}{r^3}R_{21}(r)r^2dr = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3\frac{1}{3}$$

$$\therefore\quad \langle f(r)\rangle_{21} = \frac{e^2}{2m^2c^2}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^3\frac{1}{3} \qquad \text{ⓑ}$$

ⓑをⓐに代入すると，

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{32m^2c^2}\frac{e^2}{a_0{}^3} \qquad \text{ⓒ}$$

(2) (5.110) で $n=2$ とおくと $E_2 = -e^2/8a_0$

$$\therefore\quad \frac{\Delta E}{|E_2|} = \frac{\hbar^2}{32m^2c^2}\frac{e^2}{a_0{}^3}\cdot\frac{8a_0}{e^2}$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{137}\right)^2$$

$$= 0.0000133 \sim 10^{-5} \qquad \text{ⓓ}$$

となる．　▮

このように，$e^2/\hbar c$ ($\simeq 1/137$) を用いて (例題 3 (2)参照)，微細構造分裂が e^2/a_0 の程度の Balmer 分裂と比較して説明された．**微細構造定数**という用語は，ここに由来している．

超微細構造

これまで，原子核の場は中心対称な電場であるとみなして微細構造を議論してきた．しかし，多くの原子核は固有の磁気能率をもっている．それが電子の磁気能率

と相互作用をして縮退していたエネルギー準位をさらに分裂させる．この原子核の磁気能率に起因する準位の分裂は，スピン軌道相互作用で起こされた分裂(微細構造)に比べてはるかに小さいので，**超微細構造**とよばれている．

外殻に1つの s 電子をもつ水素電子に対する超微細構造分裂を計算してみよう．原子核が磁気能率 $\boldsymbol{M}_{\rm P}$ をもつ点状の双極子であるとすると，

$$\boldsymbol{M}_{\rm P}=\frac{|e|g_{\rm P}}{2Mc}\hat{\boldsymbol{I}}=g_{\rm P}\mu_{\rm P}\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\ (\boldsymbol{I}\text{ は核子のスピン}) \tag{13.18}$$

であり，古典電磁気学によるとポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=-(\boldsymbol{M}_{\rm P}\times\nabla)(1/r)$ をつくる．ここで，M，$g_{\rm P}$ は陽子の質量および g 因子であり，$\mu_{\rm P}=\dfrac{|e|\hbar}{2Mc}$ とする．これは，磁場

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})&=\nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\\&=-g_{\rm P}\mu_{\rm P}\nabla\times\left(\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\times\nabla\right)\left(\frac{1}{r}\right)\end{aligned} \tag{13.19}$$

に対応する．したがって，電子のスピンと陽子の磁気能率との相互作用項は，

$$\begin{aligned}\hat{V}_{hfs}&=\frac{|e|}{mc}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=2\mu_{\rm B}\frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\\&=-2g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar}\cdot\left[\nabla\times\left(\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\times\nabla\right)\right]\frac{1}{r}\\&=-2g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\left[\frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar}\cdot\left(\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\cdot\nabla^2-\nabla\left(\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\right)\right)\right]\frac{1}{r}\end{aligned} \tag{13.20}$$

ゆえに，s 状態での1次の摂動は，

$$\langle\hat{V}_{hfs}\rangle=-2g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\int d^3r\,|\varphi_{100}(r)|^2\left[\left\langle\frac{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar^2}\right\rangle\nabla^2-\left\langle\left(\frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar}\cdot\nabla\right)\left(\frac{\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar}\cdot\nabla\right)\right\rangle\right]\frac{1}{r}$$

s 状態は球対称であるから，$\langle(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\nabla)(\hat{\boldsymbol{I}}\cdot\nabla)\rangle\rightarrow(1/3)\langle\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}\rangle\nabla^2$

とおきかえてよく，したがって

$$\begin{aligned}\langle\hat{V}_{hfs}\rangle&=-\frac{4}{3}g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\int d^3r\,|\varphi_{100}(r)|^2\left\langle\frac{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar^2}\right\rangle\nabla^2\frac{1}{r}\\&=\frac{16\pi}{3}g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\left\langle\frac{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar^2}\right\rangle|\varphi_{100}(0)|^2\end{aligned} \tag{13.21}$$

を得る．ここで，$\nabla^2\dfrac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$ を用いた．第5章(表5.2)より $|\varphi_{100}(0)|^2=1/\pi a_0^3$ であるから，

$$\begin{aligned}\langle\hat{V}_{hfs}\rangle&=\frac{16\pi}{3}g_{\rm P}\mu_{\rm B}\mu_{\rm P}\left\langle\frac{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar^2}\right\rangle\frac{1}{\pi}\frac{1}{a_0^3}\\&=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)g_{\rm P}\frac{m}{M}\alpha^2\frac{\langle\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}\rangle}{\hbar^2}\end{aligned} \tag{13.22}$$

となる．いま，電子と核の全スピンを $\hat{\boldsymbol{F}}$ とおくと $\hat{\boldsymbol{F}}=\hat{\boldsymbol{S}}+\hat{\boldsymbol{I}}$ であり，

$$\frac{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}}{\hbar^2}=\frac{\hat{\boldsymbol{F}}^2-\hat{\boldsymbol{S}}^2-\hat{\boldsymbol{I}}^2}{2\hbar^2}=\frac{F(F+1)-3/4-I(I+1)}{2}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{cases} I & (F=I+1/2) \\ -I-1 & (F=I-1/2) \end{cases} \tag{13.23}$$

となる．$I=1/2$ のとき，両者の差は1．ゆえに，水素原子の基底状態の分裂は，

$$\Delta E=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)g_{\mathrm{p}}\frac{m}{M}\alpha^2 \tag{13.24}$$

となる．$g_{\mathrm{p}}=5.56$ を代入すると，

$$\Delta E=\frac{8}{3}(13.6\,\mathrm{eV})(5.56)\frac{1}{1840}\left(\frac{1}{137}\right)^2\simeq 5.8\times 10^{-6}\,\mathrm{eV}$$

の程度になる．

［問題 2］　水素原子の $n=2$，$l=1$ の電子状態を考えよう．そのとき，原子核がこの電子のスピン磁気能率に及ぼす磁場 $\boldsymbol{B}$ の大きさの程度を評価せよ．

［解］　電子とともに動いている座標系からみると，陽子は $-\boldsymbol{v}$ の速度で動いているので，電子の位置に $-\left(\dfrac{\boldsymbol{v}}{c}\right)\times\boldsymbol{E}$ の磁場を及ぼし，電子の磁気モーメントと相互作用して，スピン軌道相互作用を生じる．いま，$n=2$，$l=1$ の微細構造分裂 $=E_{21\frac{3}{2}}-E_{21\frac{1}{2}}=\Delta E$ とおくと，例題3のⓓより，

$$\Delta E=3.4\,\mathrm{eV}\times\frac{1}{4}\left(\frac{1}{137}\right)^2=0.0000452\,\mathrm{eV} \tag{a}$$

この ΔE は，また，原子核の及ぼす磁場 B が電子のスピンを $s_z=-1/2$ から $s_z=1/2$ にフリップさせるために要するエネルギーに Thomas 因子 1/2 をかけたものに等しいから，

$$\Delta E=\frac{1}{2}\{\mu_{\mathrm{B}}B-(-\mu_{\mathrm{B}}B)\}=\mu_{\mathrm{B}}B \tag{b}$$

ここで，$\mu_{\mathrm{B}}=$ Bohr 磁子 $=9.27\times10^{-21}\,\mathrm{erg\cdot Gauss^{-1}}$

$$=0.579\times10^{-8}\,\mathrm{eV\cdot Gauss^{-1}}$$

ゆえに，ⓐ，ⓑより，

$$B=\frac{\Delta E}{\mu_{\mathrm{B}}}=\frac{0.0000452\,\mathrm{eV}}{0.579\times10^{-8}\,\mathrm{eV\cdot Gauss^{-1}}}=7806\,\mathrm{Gauss}$$

$$\simeq 0.78\,\mathrm{Tesla}$$

電子は陽子のまわりの強い電場のなかを非常に速い速度で動くので，電子はこのような強い磁場を感じるのである．∎

[問題 3]　第5章の章末問題[6]でやったように，$Z=3$ のリチウム原子のポテンシャルは，第1近似では，

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}-\frac{Ae^2}{r^2}\quad(A>0)$$

とおいてよい．いま，このポテンシャルでSchrödinger方程式を解くと，エネルギー固有値は，

$$E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(n+\sigma)^2},\quad \sigma=-A\frac{me^2}{\hbar^2}\frac{1}{l+\frac{1}{2}}$$

で与えられた．したがって，水素原子の場合に比べて図(162ページ)のようにさがる．

(1) スピン軌道相互作用が $\hat{V}_{LS}=f(r)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ で与えられるとき，リチウム原子の $2s$，$2p$ エネルギー準位の微細構造を計算せよ．

(2) その場合，エネルギー準位がどのようにずれるか図示せよ．ただし $\langle f(r)\rangle_{nl}$ は正の小さな値として与えられたものとしてよい．

[解]　(1) $\hat{V}_{LS}$ の(13.14)での期待値をとると，$l>0$ の場合は，

$$\begin{aligned}E_{nlj}-E_n&=\langle n\,l\,j|\,\hat{V}_{LS}|\,n\,l\,j\rangle\\&=\langle f(r)\rangle_{nl}\langle l\,j|\,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\,|\,l\,j\rangle\\&=\frac{\hbar^2}{2}\langle f(r)\rangle_{nl}\begin{cases}l & \left(j=l+\frac{1}{2}\right)\\-(l+1) & \left(j=l-\frac{1}{2}\right)\end{cases}\end{aligned}\qquad\text{ⓐ}$$

∴　$2p$ 状態に対して $l=1$ とおくと，

$$E_{2\,1\,\frac{3}{2}}-E_2=\frac{\hbar^2}{2}\langle f(r)\rangle_{21}\qquad\text{ⓑ}$$

$$E_{2\,1\,\frac{1}{2}}-E_2=-\hbar^2\langle f(r)\rangle_{21}\qquad\text{ⓒ}$$

$2s$ 状態に対しては，$l=0$ だから，

$$E_{2\,0\,\frac{1}{2}}-E_2=0\qquad\text{ⓓ}$$

(2) $\langle f(r)\rangle_{21}$ は正の小さな値をとるから，エネルギー準位のずれは図13.4のようになる．　∎

[問題 4]　高速道路での黄色いランプは，ナトリウムの $3p\to3s$ への遷移によるスペクトル線である．これは，ナトリウムの D線とよばれる黄色の線で，実際はスピン軌道相互作用のため2本の接近したスペクトル線に分裂している．スピン軌道相互作用によるエネルギー準位の分裂が 2.1×10^{-3} eV のとき，2本のス

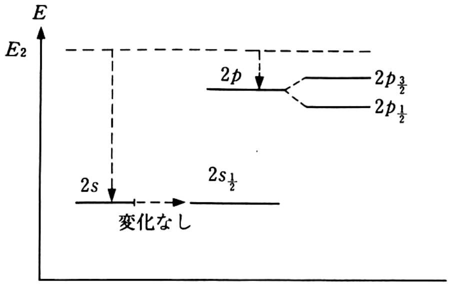


図 13.4　スピン軌道相互作用による $n=2$ の準位の分裂

ペクトル線の波長の差は何Åか．ただし，$3p$ と $3s$ のエネルギー差を 2.1 eV とせよ．

［解］　ナトリウム原子は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ の閉殻の外側に 1 個の価電子をもつアルカリ原子である．したがって，興味があるのは 11 番目の電子の $3s$ と $3p$ 状態である．

$\hat{V}_{LS}$ によってもたらされる微細構造により，

$$\Delta E=E_{31\frac{3}{2}}-E_{31\frac{1}{2}}=2.1\times10^{-3}\ \mathrm{eV}.$$

$\lambda=c/\nu$ であるから $d\lambda=-(c/\nu^2)d\nu$.

$$\therefore\quad |d\lambda|=\frac{c}{\nu^2}d\nu=\frac{hc}{(h\nu)^2}d(h\nu)$$

$$=\frac{2\pi(1.97\times10^3\ \mathrm{eV\cdot Å})}{(2.1\ \mathrm{eV})^2}(2.1\times10^{-3}\ \mathrm{eV})$$

$$=5.89\ \mathrm{Å}$$

これが求める 2 本の線の波長の差である．　▮

13.6　外部磁場中の原子スペクトル

一様な磁場のなかにおかれた原子のエネルギー準位を考えよう．一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ は，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}=1/2(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})$ から導かれる．したがって，z 方向の磁場 $\boldsymbol{B}=(0,0,B)$ は

$$\boldsymbol{A}=\left(-\frac{1}{2}yB,\ \frac{1}{2}xB,\ 0\right) \tag{13.25}$$

ととれば十分である．スピン項を別にすれば，相互作用ハミルトニアンは，各粒子の運動量を，$\boldsymbol{p}_i\rightarrow\boldsymbol{p}_i-\dfrac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)}{c}$ とおきかえることによって得られ，

$$\hat{H}=\sum_i\left\{\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i{}^2}{2m}+V_c(r)-\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{p}}_i\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_i)+\frac{e^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)^2}{2mc^2}\right\} \tag{13.26}$$

となる．(13.25) より $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ なので，各粒子ごとに $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}$ を $\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ でおきかえることができ，さらに，

$$\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\left(-\frac{1}{2}yB\right)\hat{p}_x+\left(\frac{1}{2}xB\right)\hat{p}_y=\frac{1}{2}B\hat{L}_z \tag{13.27}$$

であるから，(13.26) の右辺第 3 項

$$=-\frac{e}{2mc}B\hat{L}_z=-\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} \tag{13.28}$$

となる．ここで，$\hat{\boldsymbol{L}}$ は全軌道角運動量の演算子である．いま，スピン磁気能率相互作用

$$-\sum_i\boldsymbol{\mu}_i\cdot\boldsymbol{B}=\sum_i\frac{-e}{mc}\hat{S}_i\cdot\boldsymbol{B}=\sum_i\frac{-e}{mc}B\hat{S}_{iz} \tag{13.29}$$

をも加えると，$\boldsymbol{B}$ について 1 次の効果 $\hat{H}_{\mathrm{B}}$ は，

$$\hat{H}_{\mathrm{B}}=-\frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)=-\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}}) \tag{13.30}$$

と書ける．ここで，$\hat{\boldsymbol{S}}=\sum_i\hat{\boldsymbol{S}}_i$ は全スピン演算子である．場の強さが弱いときには (13.26) で $\boldsymbol{A}^2$ の項は無視できて，全ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}+\hat{H}_{\mathrm{B}} \tag{13.31}$$

となる．

弱い磁場の場合

電子と磁場との間の相互作用エネルギーが，スピン軌道相互作用エネルギーに比べて十分小さい場合のエネルギー・スペクトルのずれを **Zeeman 効果**という．これは，例題 1 に示すように，縮退のある場合の摂動論の応用例となる．

例題 1　一様な弱い外部磁場 $\boldsymbol{B}$ のなかにおかれた原子を考える．いま，ハミルトニアンが (13.31) のように $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}+\hat{H}_{\mathrm{B}}$ の形で与えられているとしよう．ここで，$\hat{H}_{\mathrm{B}}$ は (13.30) で与えられるが，これをさらにつぎのようにおく．

$$\hat{H}_{\mathrm{B}}=-\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}})=-\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\boldsymbol{B} \quad ①$$

13.5 節でやったように，$\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}$ と $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ が同時対角化可能であることを用い，エネルギーのずれを $\hat{H}_{\mathrm{B}}$ の 1 次の摂動で求めよ．

解　$\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}$ は $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と可換であるから，$\hat{\boldsymbol{J}}$ の大きさを $\hbar j$ とすると，$\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}$ の固有値は，$(2j+1)$ 重に縮退している．$\hat{H}_{\mathrm{B}}$ によるエネルギーのずれを 1 次の摂動で求めるためには，そのような $(2j+1)$ 個の状態で $\hat{H}_{\mathrm{B}}$ をはさんだときの行列要素を考えれ

ばよい．いいかえると，そのような $(2j+1)$ 個の状態ではられる空間への射影演算子を $\hat{P}_j$ として，演算子 $\hat{P}_j\hat{H}_{\rm B}\hat{P}_j$ を考えればよい．①より，

$$\hat{P}_j\hat{H}_{\rm B}\hat{P}_j=-\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{P}_j\cdot\boldsymbol{B}$$

であるが，$\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{P}_j$ は $\hat{\boldsymbol{J}}$ の大きさが $\hbar j$ であるような既約な空間で定義されたベクトル演算子であるから，それは $\hat{\boldsymbol{J}}$ をこの空間に制限したものに比例するはずである．すなわち，g_j を実定数として，

$$\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{P}_j=\frac{eg_j}{2mc}\hat{P}_j\,\hat{\boldsymbol{J}}\,\hat{P}_j \tag{ⓐ}$$

と書けるはずである．ここで，$\hat{P}_j$ は $\hat{\boldsymbol{J}}$ の大きさが $\hbar j$ であるような空間への射影演算子であるから，もちろん $\hat{P}_j$ と $\hat{\boldsymbol{J}}$ は可換である．

①より，

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}})=\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{J}}+\hat{\boldsymbol{S}})$$

であるから，これをⓐに代入すると，

$$\frac{eg_j}{2mc}\hat{P}_j\,\hat{\boldsymbol{J}}\,\hat{P}_j=\frac{e}{2mc}\hat{P}_j(\hat{\boldsymbol{J}}+\hat{\boldsymbol{S}})\hat{P}_j$$

が得られる．この両辺と $\hat{\boldsymbol{J}}$ との内積をとって，$\hat{\boldsymbol{J}}$ と $\hat{P}_j$ が可換であることに注意すると，

$$g_j\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{P}_j=\hat{P}_j(\hat{\boldsymbol{J}}^2+\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\hat{P}_j=\hat{P}_j\left(\hat{\boldsymbol{J}}^2+\frac{\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{\boldsymbol{L}}^2+\hat{\boldsymbol{S}}^2}{2}\right)\hat{P}_j \tag{ⓑ}$$

が得られる．$\hat{P}_j$ の表している $(2j+1)$ 次元空間の上では，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$，$\hat{\boldsymbol{S}}^2$ は，すべて確定値 $\hbar^2j(j+1)$，$\hbar^2l(l+1)$，$\hbar^2s(s+1)$ をもっているから，ⓑは，

$$\hbar^2j(j+1)g_j\hat{P}_j=\hbar^2\left[j(j+1)+\frac{j(j+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2}\right]\hat{P}_j$$

と書ける．よって，

$$g_j=1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2j(j+1)} \tag{ⓒ}$$

であることがわかった．g_j を **Landé の g 因子**とよぶ．

z 軸方向の磁場 $\boldsymbol{B}=(0,0,B)$ をとると，①より
$\hat{H}_{\rm B}=-\hat{\mu}_zB$ であるから，ⓐを使うと，

$$\begin{aligned}\langle n\ l\ j\ m_j|\hat{H}_{\rm B}|n\ l\ j\ m_j\rangle&=-\frac{eg_j}{2mc}\langle n\ l\ j\ m_j|\hat{J}_z|n\ l\ j\ m_j\rangle B\\&=\frac{|e|\hbar B}{2mc}g_jm_j\end{aligned} \tag{ⓓ}$$

が得られる．ここで，$m_j=j,\ j-1,\ \cdots,\ -j+1,\ -j$ である．とくに，$j=l\pm\dfrac{1}{2}$，$s=\dfrac{1}{2}$ の場合には，ⓒ，ⓓより，つぎのようになる．

$$\varDelta E_{\mathrm{B}}=\frac{|e|\hbar B}{2mc}\left(1\pm\frac{1}{2l+1}\right)m_j \qquad ∎$$

電子系の全スピンがゼロの場合 ($s=0$) は，Landé の g 因子は $g=1$ である．この場合，分裂した準位の隣りどうしの間隔は，まったく状態によらず一定で $\varDelta E_{\mathrm{B}}=\dfrac{|e|\hbar B}{2mc}$ に等しく，奇数個 $(2l+1)$ 本のスペクトル線が現れる．この現象を**正常 Zeeman 効果**という．他方，アルカリ金属など一般に $s\neq0$ の原子では準位の分裂の大きさは状態に依存し，しかも s が半整数の場合は偶数本に分かれる．このような場合は，歴史的には**異常 Zeeman 効果**とよばれたが，これは磁気能率が，軌道角運動量のみでなく，スピン角運動量にもよることを示している．

強い磁場の場合

今度は，(13.31)の全ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}_{LS}+\hat{H}_{\mathrm{B}}$ で，磁場が非常に強く，$\hat{H}_{\mathrm{B}}$ の効果が $\hat{V}_{LS}$ の効果よりはるかに重要な場合を考えよう．この場合には，$\hat{V}_{LS}$ はあとから小さな摂動として加えればよい．$\hat{H}_0+\hat{H}_{\mathrm{B}}$ だけがあるとき，強磁場 $\boldsymbol{B}$ によって球対称性は完全にこわれているので，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ はもはやよい量子数ではない．よい量子数は $\hat{L}_z$ と $\hat{S}_z$ である．

したがって，強い磁場中でのエネルギー準位の分裂の大きさを計算するときには，第ゼロ近似で $\hat{V}_{LS}$ を無視して，$\hat{L}_z$，$\hat{S}_z$ の固有ケット $|n\ l\ m_l\ m_s\rangle$ を用いるのがよい．この場合，磁場 $\boldsymbol{B}$ の影響によるエネルギー準位の変化は，(13.30)より

$$\langle n\ l\ m_l\ m_s|\hat{H}_{\mathrm{B}}|n\ l\ m_l\ m_s\rangle=-\frac{e\hbar B}{2mc}(m_l+2m_s) \qquad (13.32)$$

で与えられる．とくに，$s=1/2$の場合は$m_s=\pm1/2$であるから，各エネルギー準位は，m_l+2m_s の $2l+3$ 個の可能な値に対応した等間隔 $\dfrac{|e|\hbar B}{2mc}$ の準位に分離する．l が与えられたとき，m_l+2m_s の値は $l+1,\ l,\ \cdots,\ -l,\ -(l+1)$ である．これらのうち，いちばん高い準位といちばん低い準位は縮退していないが，残りは m_l+2m_s の値に対して可能な 2 通りの組み合わせ，m_l+1 と $m_l+2+(-1)$ があるので 2 重に縮退している．この型の強い磁場中での分裂(13.32)を**Paschen-Back 効果**という．

つぎに，スピン軌道相互作用の効果を $\hat{V}_{LS}$ の 1 次の摂動で求めてみよう．

例題 2　1 電子原子に強い外部磁場が加わっているとき，$\hat{L}_z$, $\hat{S}_z$ の固有ケット $|n, l, m_l, m_s\rangle$ を用いて，(13.11)の LS 項の寄与を 1 次の摂動で求めよ．

解　(13.11)の LS 項の $|n\ l\ m_l\ m_s\rangle$ での期待値をとると，

$$\begin{aligned}\langle n\ l\ m_l\ m_s|\ \hat{V}_{LS}|\ n\ l\ m_l\ m_s\rangle &= \langle f(r)\rangle_{nl}\langle m_l\ m_s|\ \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\ |\ m_l\ m_s\rangle \\ &= \hbar^2\ m_l\ m_s\langle f(r)\rangle_{nl} \\ &= \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}\right\rangle_{nl} \qquad (13.33)\end{aligned}$$

が得られる．ここで，$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{L}_z\hat{S}_z+\frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{S}_-+\hat{L}_-\hat{S}_+)$ を用いた．エネルギーへの補正項(13.33)は量子数 m_l と m_s に依存する．これによって上に述べた縮退はとけ，縮退していない準位は少しずれる．外場が微細構造による分裂と同じ程度の分裂を起こさせる場合には LS 項をも考慮して対角化することが必要となる．∎

[問題 5]　例題 1 で $j=l\pm\frac{1}{2}$, $s=\frac{1}{2}$ の場合に，磁場 $\boldsymbol{B}$ によるエネルギーのずれに対する Landé の公式

$$\varDelta E_{\mathrm{B}}=\frac{|e|\hbar B}{2mc}\left(1\pm\frac{1}{2l+1}\right)m_j \qquad ①$$

を導いた．いま，例題 1 と同様のハミルトニアンが与えられ，

$$\hat{H}_{\mathrm{B}}=-\frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)=-\frac{eB}{2mc}(\hat{J}_z+\hat{S}_z) \qquad ②$$

としよう．そのとき，

$$\begin{aligned}\varDelta E_{\mathrm{B}} &= \left\langle n\ l\ j\left(=l\pm\frac{1}{2}\right)m_j\right|\hat{H}_{\mathrm{B}}\left|n\ l\ j\left(=l\pm\frac{1}{2}\right)m_j\right\rangle \\ &= -\frac{eB}{2mc}\left[m_j\hbar+\left\langle j\left(=l\pm\frac{1}{2}\right),\ m_j\right|\hat{S}_z\left|j\left(=l\pm\frac{1}{2}\right)m_j\right\rangle\right] \qquad ③\end{aligned}$$

となる．角運動量の合成の Clebsch-Gordan 係数を直接用いて①を導け．

[解]　$$\begin{aligned}\left|l\pm\frac{1}{2},\ m_j\right\rangle &= c_\uparrow^\pm\left|l, m_j-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &\quad +c_\downarrow^\pm\left|l, m_j+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \qquad ⓐ\end{aligned}$$

であることを思い出そう．ここで，$c_\uparrow^\pm$ ($c_\downarrow^\pm$) はスピンが上向き(下向き)状態の係数である．7.6 節の［問題 5］のⓒ, ⓓ を参照すると，

$$c_\uparrow^\pm=\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}\pm m}{2l+1}}\ ,\quad c_\downarrow^\pm=\pm\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}\mp m}{2l+1}} \qquad ⓑ$$

となる．すると，$\hat{S}_z$ の期待値は容易に計算できて，

$$\langle l\pm\frac{1}{2}\ ,\ m_j|\hat{S}_z|\,l\pm\frac{1}{2}\ ,\ m_j\rangle=\frac{\hbar}{2}|c_\uparrow^\pm|^2-\frac{\hbar}{2}|c_\downarrow^\pm|^2$$

$$=\frac{\hbar}{2}\left[\frac{l+\frac{1}{2}\pm m_j}{2l+1}-\frac{l+\frac{1}{2}\mp m_j}{2l+1}\right]$$

$$=\pm\frac{m_j\hbar}{2l+1} \qquad ⓒ$$

となる．ⓒを③に代入すると，

$$\Delta E_{\mathrm{B}}=-\frac{e\hbar B}{2mc}\left(1\pm\frac{1}{2l+1}\right)m_j \qquad ⓓ$$

が得られる．■

[問題 6]　リチウム原子を弱い外部磁場のなかに入れた場合，基底状態 $2s_{\frac{1}{2}}$ と第 1 励起状態 $2p_{\frac{1}{2}}$，$2p_{\frac{3}{2}}$ のエネルギー準位は，どのように分裂するか．

[解]　例題 1 のⓒに j，l，s の値を代入して g 因子を計算しておこう．

$2s_{\frac{1}{2}}$ のとき，$j=1/2$，$l=0$，$s=1/2$　∴　$g=2$

$2p_{\frac{1}{2}}$ のとき，$j=1/2$，$l=1$，$s=1/2$　∴　$g=2/3$

$2p_{\frac{3}{2}}$ のとき，$j=3/2$，$l=1$，$s=1/2$　∴　$g=4/3$

したがって，$2s_{\frac{1}{2}}$ のとき，$\Delta E_{\mathrm{B}}=\frac{|e|\hbar B}{2mc}2m_j\,(m_j=1/2,\,-1/2)$ ⓐ

$2p_{\frac{1}{2}}$ のとき，$\Delta E_{\mathrm{B}}=\frac{|e|\hbar B}{2mc}\frac{2}{3}m_j \quad (m_j=1/2,\,-1/2)$ ⓑ

$2p_{\frac{3}{2}}$ のとき，$\Delta E_{\mathrm{B}}=\frac{|e|\hbar B}{2mc}\frac{4}{3}m_j \quad (m_j=3/2,\ 1/2,\,-1/2,\ -3/2)$ ⓒ

ゆえに，Zeeman 分裂は図 13.5 のようになる．■

[問題 7]　水素原子のハミルトニアンが次式で与えられている．

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V_{\mathrm{C}}(r)+f(r)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}-\frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z) \qquad ①$$

水素原子の $n=2$, $l=1$ の状態を考えたとき，第 3 項と第 4 項の摂動項が同じ程度の大きさになるためには，外部からどの程度の強さの磁場をかければよいか．

[解]　まず，$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ の項については，(13.15)，(13.17) より，

$E_{n\,l\,j(=l+\frac{1}{2})}-E_{n\,l\,j(=l-\frac{1}{2})}=\frac{\hbar^2}{2}(2l+1)\langle f(r)\rangle_{nl}$ となる．

ゆえに，$n=2$，$l=1$ のときには，前節の例題 3 でやったように，

$$\Delta E=E_{2\,1\,\frac{3}{2}}-E_{2\,1\,\frac{1}{2}}=\frac{3\hbar^2}{2}\langle f(r)\rangle_{21}=\frac{\hbar^2}{32m^2c^2}\frac{e^2}{a_0{}^3} \qquad ⓐ$$

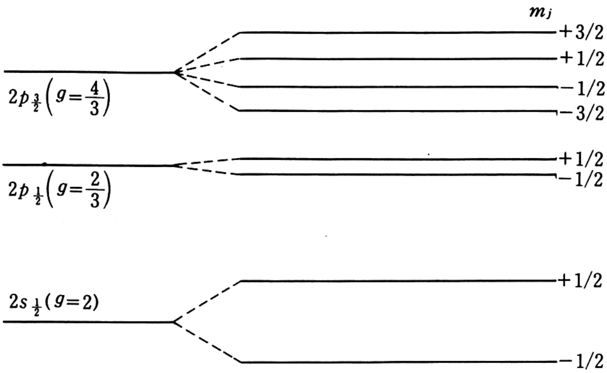


図 13.5　リチウムの $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ 準位の Zeeman 分裂

磁場の項に対しては，例題 1 より，

$$\langle \hat{H}_{\mathrm{B}} \rangle = \left\langle \frac{|e|B}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right\rangle = \frac{|e|\hbar B}{2mc}\left(1 \pm \frac{1}{2l+1}\right) m_j \qquad ⓑ$$

∴　$j=3/2$ のとき，m_j と m_{j-1} とのエネルギー差は $\dfrac{|e|\hbar B}{2mc}\times 2$, $j=1/2$ のときは，$\dfrac{|e|\hbar B}{2mc}\times\left(\dfrac{1}{3}\right)$. この項は磁場 B が弱いときにいい近似であるが，ⓐと同じオーダーになった場合には，得られた値そのものを正確に計算することには意味がなく，$\dfrac{|e|\hbar B}{2mc}$ の程度と考えてよかろう．それゆえ

$$\frac{\hbar^2}{32m^2c^2}\frac{e^2}{a_0^3} \simeq \frac{|e|\hbar}{2mc}B \qquad ⓒ$$

をみたす磁場 B の大きさを求めよう．

$$ⓒの左辺 = \frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2\frac{1}{a_0^2} = (13.6\mathrm{eV})\frac{1}{16}\left(\frac{0.00387\,\text{Å}}{0.529\,\text{Å}}\right)^2$$

$$= 4.55\times 10^{-5}\mathrm{eV}$$

$$\therefore \quad B = \frac{4.55\times 10^{-5}\mathrm{eV}}{\dfrac{|e|\hbar}{2mc}} = \frac{4.55\times 10^{-5}\mathrm{eV}}{0.579\times 10^{-8}\mathrm{eV}\cdot\mathrm{Gauss}^{-1}}$$

$$= 7.86\times 10^3\mathrm{Gauss} = 0.786\ \mathrm{Tesla} \qquad ⓓ$$

となる．　▮

13.7　Born-Oppenheimer の方法

分子のなかの電子軌道をみつける問題は，原子の場合に比べてずって複雑になる．理由は，電子の感じるポテンシャルがもはや球対称ではないからである．しかし，分子分光学におけるエネルギー準位の規則性をみると，つぎのような近似が成り立つことがわかる．実際これらの準位は，電子の運動，原子核の振動，回転の 3 つのタイプが存在することを暗示している．すなわち，分子中の原子核は古典的な平衡点にあって，そのまわりをゆっくりと振動したり，回転している．一方，電子群は原子核の Coulomb ポテンシャルのなかを速い速度で動きまわると推論することができる．

断熱近似

いま，n 個の電子(質量 m)，N 個(質量 M_j, $j=1$, …, N)の原子核からなる分子を考えよう．この系に対する時間を含まない Schrödinger 方程式は容易に書きくだすことができて，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\Delta_j+V_{ee}+V_{eN}+V_{NN}\right)\varphi=E\varphi \tag{13.34}$$

となる．ここで，

$V_{ee}=e\text{-}e$ 斥力 Coulomb 相互作用

$V_{eN}=e\text{-}N$ 引力 Coulomb 相互作用

$V_{NN}=N\text{-}N$ 斥力 Coulomb 相互作用

重要なことは，$M_j \gg m$ のため原子核の運動エネルギー $T_N(\sim 1/M_j)$ はとても小さく，(13.34)の固有値問題を解くとき，小さな摂動として，とりあえず省略することができる．これを，**Born-Oppenheimer 近似**または**断熱近似**とよぶ．そうすると，(13.34)は空間に固定された原子核に関しての電子の運動に対する $\boldsymbol{r}_i$ についての波動方程式となる．したがって，原子核の座標 R_j は，ただのパラメーターとなる．

いま，電子系の波動関数を $u(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{R}_j)$ と書くと，u はつぎの方程式をみたす．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i+V\right)u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)=U(\boldsymbol{R}_j)u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j) \tag{13.35}$$

ここで，$V_{ee}+V_{eN}+V_{NN}=V$ とおいた．したがって，$\boldsymbol{R}_j$ のそれぞれの値に対して，(13.35)の固有値として $U(\boldsymbol{R}_j)$ を求めることができる．(13.34)は電子の座標 $(\boldsymbol{r}_i)$ と核の座標 $(\boldsymbol{R}_j)$ に分離できない形になっている．しかし，Born-Oppenheimer 近似では，核の状態を記述する波動関数 $w(\boldsymbol{R}_j)$ を用いて，

$$\varphi(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{R}_j)=u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)w(\boldsymbol{R}_j) \tag{13.36}$$

のように分離した形に書いておく．

(13.35)に右から $w(\boldsymbol{R}_j)$ をかけ，(13.36)を使うと，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i+V\right)\varphi=U(\boldsymbol{R}_j)\varphi \tag{13.37}$$

となる．

これを(13.34)に代入すると，

$$\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\Delta_j+U(\boldsymbol{R}_j)\right]\varphi=E\varphi \tag{13.38}$$

を得る．これは，また，つぎのように書きなおすことができる．

$$u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\Delta_j+U(\boldsymbol{R}_j)-E\right]w(\boldsymbol{R}_j)$$

$$=\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\left[w(\boldsymbol{R}_j)\Delta_j u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)+2\nabla_j u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)\nabla_j w(\boldsymbol{R}_j)\right] \tag{13.39}$$

ここで，$U(\boldsymbol{R}_j)$ の最小値の近くで $\boldsymbol{R}_j$ を動かしても，$u(\boldsymbol{r}_i\,;\,\boldsymbol{R}_j)$ の変化が大きくないとすれば，(13.39)の右辺は落ちて，核運動に対する近似的な波動方程式として，

$$\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\Delta_j+U(\boldsymbol{R}_j)\right]w(\boldsymbol{R}_j)=Ew(\boldsymbol{R}_j) \tag{13.40}$$

が得られる．ゆえに，(13.35)で求めた $U(\boldsymbol{R}_j)$ が核の運動に対するポテンシャル・エネルギーの役目をすることになる．

2 原子分子の振動と回転

ここで，一般の 2 原子分子に話を転じて，核運動に対する方程式(13.35)の解の性質を調べることにしよう．核の質量を M_1，M_2 とし，それらの相対座標のベクトル $\boldsymbol{R}$ が極座標 (R,θ,φ) をもつとすれば，相対運動に対する方程式は，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta+U(R)\right]w(R,\theta,\varphi)=Ew(R,\theta,\varphi) \tag{13.41}$$

ただし，$M=M_1M_2/(M_1+M_2)$ は換算質量である．水素原子の場合と同様に，$w(R,\theta,\varphi)=(\chi(R)/R)Y_{K\,M_K}(\theta,\varphi)$ とおけば $\chi(R)$ に対する方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\chi}{dR^2}+\left[U(R)+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR^2}\right]\chi=E\chi \tag{13.42}$$

が得られる．ただし，境界条件は $\chi(R=0)=0$ である．R は 2 個の原子核の距離であり，その原子核を含む原子が分子をつくっているのであるから，$U(R)$ はある距離 R_0 のところで最小値になっているはずである．$U(R)$ を Taylor 展開し，2 次までで近似すると，$U(R)=U(R_0)+\dfrac{1}{2}K_0(R-R_0)^2$ のように書ける(ただし，$K_0>0$)．エネルギーの低い準位を求めるにはこれで十分であり，エネルギー固有値は近似的に，

$$E=U(R_0)+\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar w+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR_0{}^2} \tag{13.43}$$

となる．ここで $v=0,1,2,\cdots$, $w=(K_0/M)^{\frac{1}{2}}$ である．第2項は分子の振動のエネルギーであり，第3項は分子を剛体であるとしたときの回転のエネルギーである．

水素分子

では，さきほど述べた Born-Oppenheimer の方法を最も簡単な2原子分子である水素分子に適用して，その結合の仕方を調べてみよう．

いま，2個の陽子を A，B で表し，電子を 1，2 で表すと(図13.6参照)，固定された R に対して，2個の電子のみたす Schrödinger 方程式は(13.35)よりつぎのように書ける．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1+\Delta_2)+e^2\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{A1}}-\frac{1}{r_{B2}}-\frac{1}{r_{B1}}-\frac{1}{r_{A2}}\right)\right]u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;R)$$
$$=U(R)u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;R) \tag{13.44}$$

(13.44)の $U(R)$ を求めるために，$u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;R)$ の試行関数としてつぎの関数型を仮定してみよう．すなわち，スピン1重項に対して，

$$u_s(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)=N_s[u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2)+u_B(\boldsymbol{r}_1)u_A(\boldsymbol{r}_2)] \tag{13.45}$$

スピン3重項に対して，

$$u_t(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=N_t[u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2)-u_B(\boldsymbol{r}_1)u_A(\boldsymbol{r}_2)] \tag{13.46}$$

とおこう．ここで，水素分子の基底状態を考えているから，

$$u_A(\boldsymbol{r})=\left(\frac{1}{\pi a_0{}^3}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A|}{a_0}\right),\quad u_B(\boldsymbol{r})=\left(\frac{1}{\pi a_0{}^3}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_B|}{a_0}\right) \tag{13.47}$$

である．$\int u^*_{s(t)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)u_{s(t)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)d^3r_1d^3r_2=1$ に(13.45～13.47)を代入して規格化因子 $N_s(N_t)$ を求めると，$S\equiv\int u^*_A(\boldsymbol{r})u_B(\boldsymbol{r})d^3r$ を用いて，

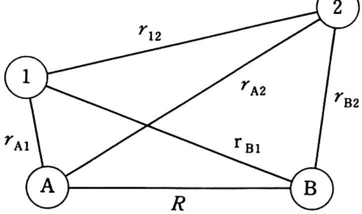


図13.6　水素分子

$$N_s=\frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}},\quad N_t=\frac{1}{\sqrt{2(1-S^2)}} \tag{13.48}$$

を得る．いま，(13.44)において，ハミルトニアンをつぎのように分けて考えよう．

$$\hat{H}=\hat{H}_A(1)+\hat{H}_B(2)+\hat{H}_I+\frac{e^2}{R} \tag{13.49}$$

ただし，$\hat{H}_A(1)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{e^2}{r_{A1}}$，$\hat{H}_B(2)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{e^2}{r_{B2}}$

$$\hat{H}_I=\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_{B1}}-\frac{e^2}{r_{A2}}$$

とおけば，$\hat{H}_A(1)$，$\hat{H}_B(2)$ は水素原子のハミルトニアンであるから，$\hat{H}_A(1)u_A(\boldsymbol{r}_1)=E_{1s}u_A(\boldsymbol{r}_1)$，$\hat{H}_B(2)u_B(\boldsymbol{r}_2)=E_{1s}u_B(\boldsymbol{r}_2)$ となる．

したがって，(13.45)，(13.46)の状態で $\hat{H}$ の期待値をとると，

$$E_s=\frac{1}{1+S^2}[\langle AB|\hat{H}|AB\rangle+\langle BA|\hat{H}|AB\rangle] \tag{13.50a}$$

$$E_t=\frac{1}{1-S^2}[\langle AB|\hat{H}|AB\rangle-\langle BA|\hat{H}|AB\rangle] \tag{13.50b}$$

ただし，

$$\langle BA|\hat{H}|BA\rangle=\langle AB|\hat{H}|AB\rangle=\iint d^3r_1d^3r_2u_A^*(\boldsymbol{r}_1)u_B^*(\boldsymbol{r}_2)\hat{H}u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2)$$

$$\langle AB|\hat{H}|BA\rangle=\langle BA|\hat{H}|AB\rangle=\iint d^3r_1d^3r_2u_B^*(\boldsymbol{r}_1)u_A^*(\boldsymbol{r}_2)\hat{H}u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2)$$

(13.49)の $\hat{H}$ を代入すると，すぐ計算できて，

$$\langle AB|\hat{H}|AB\rangle=2E_{1s}+\frac{e^2}{R}+V_C(R) \tag{13.51}$$

ただし，

$$V_C(R)=\iint d^3r_1d^3r_2u_A^*(\boldsymbol{r}_1)u_B^*(\boldsymbol{r}_2)\left(\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_{B1}}-\frac{e^2}{r_{A2}}\right)u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2) \tag{13.52}$$

同様にして，

$$\langle BA|\hat{H}|AB\rangle=S^2\left(2E_{1s}+\frac{e^2}{R}\right)+V_{EX}(R) \tag{13.53}$$

ここで

$$V_{EX}(R)=\iint d^3r_1d^3r_2u_B^*(\boldsymbol{r}_1)u_A^*(\boldsymbol{r}_2)\left(\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_{B1}}-\frac{e^2}{r_{A2}}\right)u_A(\boldsymbol{r}_1)u_B(\boldsymbol{r}_2) \tag{13.54}$$

で複雑ではあるが，だいたい S^2 に比例している．(13.51)，(13.53)を(13.50a)に代入すると，

$$E_s=2E_{1s}+\frac{e^2}{R}+\frac{V_C(R)+V_{EX}(R)}{1+S^2} \tag{13.55a}$$

(13.50b)に代入すると，

$$E_{\mathrm{t}}=2E_{1s}+\frac{e^2}{R}+\frac{V_{\mathrm{C}}(R)-V_{\mathrm{EX}}(R)}{1-S^2} \tag{13.55b}$$

が得られる．さて，この 2 つの状態(1 重項，3 重項)のうち，どちらのエネルギー(E_{s} と E_{t})が低く，実際の基底状態では，どちらの電子状態が実現されているかを調べてみよう．そのためには，Coulomb 積分 $V_{\mathrm{C}}(R)$ と交換積分 $V_{\mathrm{EX}}(R)$ 等の数値を調べなければならない．数値計算の結果を図 13.7 に示しておく．これは R の値をいろいろと仮定しては，その値のときの $E(R)-2E_{1s}$ を計算して図示したものである．図より明らかなように，3 重項の場合には，結合エネルギーにあたる $E_{\mathrm{t}}(R)-2E_{1s}$ は常に正であるが，1 重項の場合には，$E_{\mathrm{s}}(R)-2E_{1s}$ は $R=0.86$ Å で最小値をとり負になる．この値は実験値 0.741 Å とほぼ一致している．また結合エネルギーは -3.14 eV (図 13.7 参照)となり，実験値 -4.747 eV との一致も悪くはない．このようにして，水素分子はスピン 3 重項では結合しないが，スピン 1 重項で結合することがわかった．

では，なぜ水素分子は 1 重項状態で結合状態をつくるのかを考えてみよう．3 重項状態では，電子の空間分布を表す電子軌道関数 $u_{\mathrm{t}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は 2 個の電子の入れ替えに対して反対称である．このことは両方の電子が 2 個の陽子の中間に存在する確率が小さいことを意味する．一方，1 重項状態においては，$u_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は電子の入れ替えに対して対称なので，2 個の核の間に大きな電子分布があることを意味する．この領域に電子が分布すると，2 個の陽子との間の Coulomb 引力が最大となり，電子と電子の間の斥力を打ち消していると考えられる．このことから，$u_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の軌道状態を **bonding state**(結合しやすい状態)とよぶ．そして，この結合状態では，1 個の電子が核 A に属する状態と核 B に属する状態とが同等にまざっているので**共有結合**という．

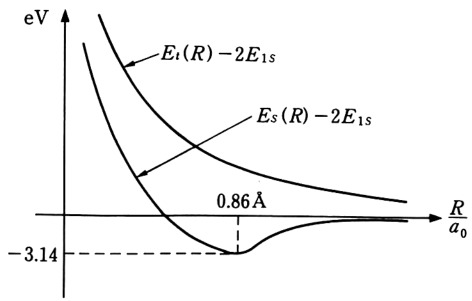


図 13.7　水素分子に対する 1 重項エネルギー (E_s) と 3 重項エネルギー (E_t)

13.8 原子核の殻模型

これまでの議論で，量子力学は原子・分子の世界（$\sim 10^{-8}$cm）をきわめてよく記述する物理法則であることが確かめられた．この量子力学は，さらに小さい原子核の世界（$\sim 10^{-13}$cm）にも適用可能であろうか．

1940 年代の終わり頃，蓄積された原子核の実験データの分析に基づいて，**魔法の数(マジック・ナンバー)**という顕著な実験的事実が見い出されていた．すなわち，原子核の結合エネルギーの核子数による変化を調べてみると，中性子または陽子の数が，

$$2,\ 8,\ 20,\ 28,\ 50,\ 82,\ 126 \tag{13.56}$$

に一致すると結合エネルギーが突然大きくなる．これらの数をマジック・ナンバーとよぶ．これは原子のなかの電子群において，電子配置がいわゆる閉殻構造になるとき，これらの原子はとくに安定になるという事情によく似かよっている．すなわち，$Z=2$(He)，$Z=10$(Ne)，$Z=18$(Ar)，$Z=36$(Kr)，$Z=54$(Xe)，$Z=86$(Rn) などがその例である．

この原子の閉殻構造と原子核のマジック・ナンバーとの類似に着目し，Mayer 等は原子核内の核子も，原子のなかの電子運動と同じように独立に運動していると考え，核子の軌道への配置が閉殻構造になったときにマジック・ナンバーが現れるであろうと予測した．すなわち，原子核のなかで各核子は，他の核子によって作られた平均化された場のなかを，ある程度独立に運動しているという仮定から出発する．多くの核においては，平均的な核の場は球対称性をもっている．したがって，原子核中の各々の核子の状態は，核子の軌道角運動量を決める量子数 l の値で指定することができる．

例題 原子核内のそれぞれの核子は，他の核子によって作られる平均ポテンシャルのなかを独立に運動していると考える．いま，この平均ポテンシャルを 3 次元調和振動子で近似できると仮定してみよう．

(1) 定常状態に対する Schrödinger 方程式を解いて，この粒子のエネルギー準位の構造を調べ，各準位の縮退度を求めよ．

(2) これらの準位を中性子，陽子のそれぞれについて考え，Pauli の原理にしたがって，下の準位から順に中性子または陽子をつめてゆくと，閉殻構造に対応する粒子数はいかほどになるか．

解 (1) 第 5 章の章末問題［7］で 3 次元の調和振動子の問題を考えた．まとめると，エネルギー準位の構造と各準位の縮退度は表 13.3 に示すようになる．

表13.3　3次元調和振動子のエネルギー準位と縮退度と核子数（中性子または陽子の数）
記号 s, p, d の前の数は，おのおのの角運動量をもつ準位のうちで，何番目のものであるかを示す．原子の場合の主量子数から p の場合は1，d の場合は2，…だけ引いたものになっている．

l		エネルギー準位	縮退度	核子数
0	$1s$	$3/2\hbar\omega$	1	2
1	$1p$	$5/2\hbar\omega$	3	6
0	$2s$	$7/2\hbar\omega$	1	2
2	$1d$		5	10
1	$2p$	$9/2\hbar\omega$	3	6
3	$1f$		7	14

(2) 下の準位から順に中性子（または陽子）をつめてゆくと $\dfrac{3}{2}\hbar\omega$ の準位に2核子，$\dfrac{5}{2}\hbar\omega$ の準位までに $(2+6=)8$ 核子，$\dfrac{7}{2}\hbar\omega$ の準位までに $(8+2+10=)20$ 核子，$\dfrac{9}{2}\hbar\omega$ の準位までに $(20+6+14=)40$ 核子となる（表13.3）．このように，閉殻構造に対応する粒子数は，2，8，20，40，…となり，20より上のマジック・ナンバーは出てこない．井戸型ポテンシャルの場合も事情は同じであって，中心力のみを考えていたのではマジック・ナンバーは説明できない．　∎

そこで，Mayer 等がマジック・ナンバーを説明するために与えた答は，

　中性子と陽子は，短距離型で球対称の中心力ポテンシャルのなかで運動しており，また同時に強いスピン軌道力が働いているとすればよい．

というものである．電子の軌道運動によって生じるスピン軌道力よりも，はるかに強いスピン軌道力がなぜ核内で生じるかについては，ここでは立ち入らないことにする．

13.5節の原子の場合と同様な型のスピン軌道力を仮定すると，1個の核子に対するハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M}+\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2Mr^2}+V(r)-\frac{\kappa}{2M^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \tag{13.57}$$

と書ける．M は核子質量，$V(r)$ は中心力ポテンシャル，κ は次元のない未定定数で実験に合うように決めることにしよう．(13.57)で，$\kappa=0$ のときのエネルギーを $E^{(0)}_{nl}$ とおくと，$\kappa\neq0$ のとき1次の摂動で，

$$E_{nlj}=E^{(0)}_{nl}-\frac{\kappa}{2M^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{nl}\left\{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\frac{\hbar^2}{2} \tag{13.58}$$

が得られる．いま，

$$\alpha_{n\,l}=\frac{\kappa\hbar^2}{4M^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{n\,l} \tag{13.59}$$

とおくと，

$$j=l+1/2\ のとき，\ E_{n\,l\,l+\frac{1}{2}}=E_{n\,l}^{(0)}-\alpha_{n\,l}l,$$

$$j=l-1/2\ のとき，\ E_{n\,l\,l-\frac{1}{2}}=E_{n\,l}^{(0)}+\alpha_{n\,l}(l+1)$$

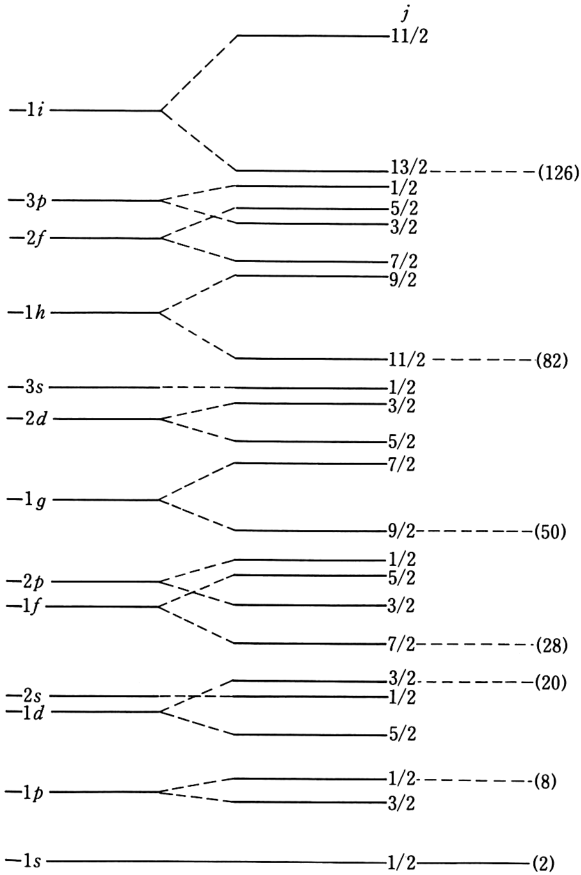


図 13.8　原子核中の核子エネルギー準位の図
左側には l を表す記号(スピン軌道力=0 のとき)．中央は j の値(スピン軌道力≠0 のとき)を示す．いちばん右側の括弧のなかの数字は，それより低いエネルギー準位をすべてつめたときの中性子（陽子）の数を示す．

となり，準位はスピン軌道力のために 2 本に分離し，図 13.8 のようになる(ポテンシャルとしては井戸型ポテンシャルの両端をまるめた場合)．ここで $\kappa>0$ とすると，全角運動量が大きいほうの $j=l+1/2$ の準位は，$j=l-1/2$ の準位よりも下にでて，両者の間隔は $(2l+1)$ に比例する．

図 13.8 において，エネルギーが少ししか違わない一群の状態を核子の殻という．中性子に対する第 1 の殻は $1s_{1/2}$ 状態からなり，2 個の中性子が入ることができる．第 2 の殻は $1p_{3/2}$，$1p_{1/2}$ が対応して 6 個の中性子が入り，それより低いエネルギー準位をすべてつめたときの中性子数は 8 個となる．このようにして，マジック・ナンバー 2，8，20，28，50，82，126 が得られる．陽子の場合にも同じ議論が成り立つ．

13.9　素粒子の模型

量子力学は原子核をもよく記述する物理法則であることがわかったが，さらに小さいミクロの世界にも適用可能であろうか．

クォーク模型

1963 年, Gell-Mann と Zweig は陽子, 中性子, π 中間子などの素粒子よりもっと基本的な階層の究極粒子**クォーク**[1)]が存在し，それがいくつか組み合わさって，ハドロンとよばれる上記の素粒子をつくるのではないかという理論を提唱した．ハドロンとは強い相互作用をする素粒子の総称である．クォークは独特な性質をもっていると考えられている．たとえば，u(または c)クォークは 2/3 の電荷をもっているし，d(または)s クォークは −1/3 の電荷をもっている．表 13.4 にクォークの量子数をまとめておこう．

さて，2 個の粒子の束縛状態は，これまで，基本的な相互作用を調べるうえで中心

表13.4　クォークの量子数

クォークの種類	電荷	スピン
d	−1/3	1/2
u	2/3	1/2
s	−1/3	1/2
c	2/3	1/2
b	−1/3	1/2
t	2/3	1/2

1)　Gell-Mann は，ジェイムズ・ジョイスの作品『フィネガンズ・ウェイク』(邦訳同名、河出書房新社) のなかの一句からとって，この究極粒子を〝クォーク〞と命名した．

的役割をはたしてきた．たとえば，量子力学の発展における水素原子はその典型的な1例であろう．まったく同じようにして，重いクォークと反クォークの束縛状態は，強い相互作用を調べるうえで重要な役割を演じている．c クォークは重いので $c\bar{c}$ の束縛状態を調べるのに非相対論的近似が使える．そこで，非相対論的な量子力学をこの系に適用してみよう．

チャーモニウムのポテンシャル模型

$c\bar{c}$ 系は，電子と陽電子の束縛状態であるポジトロニウムに形式的によく似ているので，$c\bar{c}$ 系はチャーモニウムとよばれている．$c\bar{c}$ の束縛状態は球対称なポテンシャル模型で表され，かつ，非相対論的 Schrödinger 方程式で記述できるものと仮定しよう．$c\bar{c}$ の重心系で考えると，Schrödinger 方程式は 5.8 節より，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m_c}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{l(l+1)\hbar^2}{m_c r^2}+V(r)\right]R_l(r)=ER_l(r) \tag{13.60}$$

となる．ここで，換算質量$=m_c/2$ を用いた．c と $\bar{c}$ の距離が小さいときは，Coulomb 型のポテンシャルを予想できる．距離 r が大きくなると r とともに増大する閉じ込めポテンシャルが効いてくると考えられる．したがって，現象論的に一応満足できる単純なポテンシャルは，

$$V(r)=-\frac{\beta}{r}+\frac{r}{a^2} \quad \text{(Cornell ポテンシャル[1])} \tag{13.61}$$

のように書けるだろう．

まず，簡単のため，スピン 3 重項の場合を考えよう．未知定数は m_c, a, β の 3 個なので，$1S$ 状態，$2S$ 状態，$1P$ 状態のそれぞれの質量，3.095 GeV, 3.684 GeV, 3.522 GeV を与えると，

$$m_c=1.84\ \text{GeV},\quad a=2.34\ \text{GeV}^{-1},\quad \beta=0.52 \tag{13.62}$$

と決まり，$m(3S)=4.11$ GeV（実験値 4.028 GeV），$m(4S)=4.46$（実験値 4.41 GeV），$m(5S)=4.79$ GeV となる．ゆえに，実験との一致はそれほど悪くはない．

さらにクォーク・スピンをとり入れると，それぞれのエネルギー準位は，スピン 1 重項のパラ・チャーモニウムとスピン 3 重項のオルソ・チャーモニウムに分かれる．

さらにスピン軌道力の効果も考えるとチャーモニウムのエネルギー準位が図 13.9 のように得られる．

このように，とても簡単な量子力学の計算でチャーモニウムのいろいろの量子数

1) たとえば，E.Eichten, K.Gottfried, T.Kinoshita, K.D.Lane, T.M.Yan, *Phys.Rev.*, **21D**, 203 (1980)

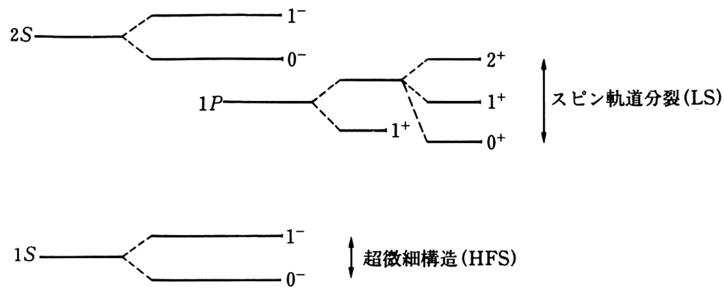


図13.9　チャーモニウムの分光学

をもつ状態の質量が計算でき，定性的には実験値とのいい一致が得られる．

第13章　章　末　問　題

[1]　一様な電場中に水素原子をおいたとき，定常状態のエネルギー準位がずれる現象を発見者の名にちなんで，**Stark 効果**とよんでいる．よく知られているように，$n=2$ に対応する第1励起準位は4重に縮退している．いま，一様な電場 $|\boldsymbol{E}|$ を z-方向にかけたとき，1次の摂動でエネルギー準位の変化を求めよ．また，そのときの固有関数を求めよ．

[解]　スピンを無視して上記電場中でのハミルトニアンを書くと，

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r{}^2}{2m} + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2} - e|\boldsymbol{E}|z$$
$$= \hat{H}_0 + \hat{H}' \qquad ⓐ$$

いま，4重に縮退した $n=2$ に対応する波動関数を，$|n\ l\ m\rangle$ の記法で，$|2\ 0\ 0\rangle$，$|2\ 1\ 1\rangle$，$|2\ 1\ 0\rangle$，$|2\ 1\ -1\rangle$ と書こう．$\hat{H}'$ の行列要素のなかでゼロでないのは，パリティの異なる状態間のみにおいて，すなわち，$l=1$ と $l=0$ の間のみであり，m の値も等しくなければならない．したがって，

$$\langle 2\ 1\ 0|\hat{H}'|2\ 0\ 0\rangle = \langle 2\ 0\ 0|\hat{H}'|2\ 1\ 0\rangle$$
$$= \int \frac{\left(1-\dfrac{r}{2a_0}\right)}{(2a_0{}^3)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_{00}^* \cdot \left(-e|\boldsymbol{E}|r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_{10}\right) \cdot$$
$$\cdot \frac{\dfrac{r}{2a_0}}{(6a_0{}^3)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_{10}\, d^3 r$$

$$= -\frac{e|\boldsymbol{E}|}{12a_0{}^4}a_0{}^5\int_0^\infty \rho^4\left(1-\frac{\rho}{2}\right)e^{-\rho}d\rho\int d\Omega\,|\,Y_{10}(\theta,\varphi)|^2$$

$$= -\frac{e|\boldsymbol{E}|}{12a_0{}^4}a_0{}^5(-36) = 3e|\boldsymbol{E}|a_0 = -3|e||\boldsymbol{E}|a_0 \qquad ⓑ$$

であり，その他の行列要素 =0 となる．$n=2$，$l=1$，$m=0$ のみが $2s$ 状態(必然的に $m=0$)とまざるので，$m=\pm1$ のものはエネルギー準位が変化しない．ゆえに，エネルギーのずれ E' を計算するには，

$$\begin{vmatrix} 0-E' & -3|e||\boldsymbol{E}|a_0 \\ -3|e||\boldsymbol{E}|a_0 & 0-E' \end{vmatrix} = 0 \qquad ⓒ$$

とおけばよい．これを解くと，

$$E' = \pm 3|e||\boldsymbol{E}|a_0 \qquad ⓓ$$

新しい固有関数を $\varphi = a|2\,0\,0\rangle + b|2\,1\,0\rangle$ とおいて行列の方程式に代入すると，

$E'=3|e||\boldsymbol{E}|a_0$ に対して，$\varphi_+ = 1/\sqrt{2}(|2\,0\,0\rangle - |2\,1\,0\rangle)$

$E'=-3|e||\boldsymbol{E}|a_0$ に対して，$\varphi_- = 1/\sqrt{2}(|2\,0\,0\rangle + |2\,1\,0\rangle)$

$E'=0$ に対しては，$|2\,1\,1\rangle$，$|2\,1\,-1\rangle$

が求める固有関数になる．

[2]　原子間のポテンシャルが，$V(r) = V_0\left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}\right)$，$\rho = \frac{r}{a_0}$ で与えられる2原子分子(原子の質量$=M$)について考える．

(1) 角運動量 l に対する有効ポテンシャルを求め，そのポテンシャルの最低点での回転スペクトルおよび微小振動のエネルギーを求めよ．

(2) a_0 が Bohr 半径 $\left(\simeq \frac{\hbar^2}{me^2}\right)$，$V_0$ が電子のエネルギー程度 $\left(\simeq \frac{me^4}{2\hbar^2}\right)$ としたとき，電子のエネルギー準位，振動準位および回転準位の相対的な大きさの程度を評価せよ．ただし，m は電子の質量である．

(3) 上記のポテンシャルに対する離散スペクトル E_{nl} は正確に求めることができる．E_{nl} を求め，$\frac{m}{M} \ll 1$ の場合に(1)の結果と比較せよ．

[解]　(1) $$\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M} = \frac{\hat{p}_r{}^2}{2M} + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2Mr^2} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \qquad ⓐ$$

∴　l-波に対する有効ポテンシャル $W(r)$ は，

$$W(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} = V_0\left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Ma_0{}^2\rho^2} \qquad ⓑ$$

ゆえに，$\varphi_l(r)=\chi(r)/r$ とおくと Schrödinger 方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2Ma_0{}^2}\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+W\chi=E\chi \tag{ⓒ}$$

ⓑにおいて，$\alpha^2=\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2Ma_0{}^2}$ とおくと $W'=0$ をみたす ρ_0 は，

$$\rho_0=1+\frac{\alpha^2}{V_0}\quad\left(\frac{\alpha^2}{V_0}=\frac{m}{M}l(l+1)\ll 1\right) \tag{ⓓ}$$

$W''(\rho_0)\simeq 2(V_0-3\alpha^2)$ を用いてⓓをⓑに代入すると，

$$\begin{aligned}W(\rho)&=W(\rho_0)+W'(\rho_0)(\rho-\rho_0)+W''(\rho_0)\frac{(\rho-\rho_0)^2}{2}+\cdots\\&\simeq -V_0+\alpha^2+(V_0-3\alpha^2)(\rho-\rho_0)^2\end{aligned} \tag{ⓔ}$$

したがって，ρ_0 のまわりで展開した場合の波動方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2Ma_0{}^2}\chi''+[-V_0+\alpha^2+(V_0-3\alpha^2)(\rho-\rho_0)^2]\chi=E\chi \tag{ⓕ}$$

$$\therefore\quad \text{回転エネルギー}=\alpha^2=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Ma_0{}^2} \tag{ⓖ}$$

$$\text{振動エネルギー}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{ⓗ}$$

ただし，$\omega=\sqrt{\dfrac{2V_0}{Ma_0{}^2}}\sqrt{1-\dfrac{3\alpha^2}{V_0}}\simeq\omega_0\left(1-\dfrac{3\alpha^2}{2V_0}\right)$

(2) 電子のエネルギー準位 $\simeq\dfrac{me^4}{2\hbar^2}$

$$\text{振動準位}\simeq\hbar\omega_0=\hbar\sqrt{\frac{2V_0}{Ma_0{}^2}}=\sqrt{\frac{m}{M}}\frac{me^4}{\hbar^2}$$

$$\text{回転準位}\simeq\frac{\hbar^2}{2Ma_0{}^2}=\frac{m}{2M}\frac{me^4}{\hbar^2}$$

したがって，相対的な大きさの程度は，$1:\sqrt{\dfrac{m}{M}}:\dfrac{m}{M}$ となる．

(3) 解くべき方程式は，ⓑ，ⓒより，

$$-\frac{\hbar^2}{2Ma_0{}^2}\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\left(-\frac{2V_0}{\rho}+\frac{V_0+\alpha^2}{\rho^2}\right)\chi=E\chi$$

$\hbar=1$ のユニットをとり，$E=-\dfrac{\kappa^2}{2Ma_0{}^2}$，$2Ma_0{}^2V_0=\gamma^2$ とおくと，

$$\chi''+\left(-\kappa^2+\frac{2\gamma^2}{\rho}-\frac{\gamma^2+l(l+1)}{\rho^2}\right)\chi=0 \tag{ⓘ}$$

$\chi=\rho^s f(\rho)$ とおくと，

$$s^2-s-(\gamma^2+l(l+1))=0.\quad\therefore\quad s=\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}+\gamma^2+l(l+1)}$$

原点で正則な解は $s>0$ の解.

$$\therefore \quad s=\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\gamma^2+l(l+1)} \qquad \text{ⓙ}$$

f に対する方程式は,

$$\rho f''+2sf'-\kappa^2\rho f+2\gamma^2 f=0$$

$f=e^{-\kappa\rho}u$ とおくと,

$$\rho u''+(2s-2\kappa\rho)u'+(2\gamma^2-2s\kappa)u=0 \qquad \text{ⓚ}$$

付録Aを参照すると,

$$u=F\left(s-\frac{\gamma^2}{\kappa},\ 2s,\ 2\kappa\rho\right) \qquad \text{ⓛ}$$

となる. これが有限項の多項式となるためには,

$$s-\frac{\gamma^2}{\kappa}=-n,\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

$$\therefore \quad \kappa=\frac{\gamma^2}{s+n}$$

$$\begin{aligned}\therefore \quad E_{nl}&=-\frac{\kappa^2}{2Ma_0{}^2}=-\frac{(\gamma^2)^2}{2Ma_0{}^2(s+n)^2}\\&=-\frac{4M^2a_0{}^4V_0{}^2}{2Ma_0{}^2\left(\frac{1}{2}+n+\sqrt{\frac{1}{4}+\gamma^2+l(l+1)}\right)^2}\\&=-\frac{4M^2a_0{}^4V_0{}^2}{2Ma_0{}^2\left(\frac{1}{2}+n+\sqrt{2Ma_0{}^2V_0+\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}\right)^2}\end{aligned} \qquad \text{ⓜ}$$

$\dfrac{m}{M}\ll1$ の場合に(1)の結果と比較するため展開すると,

$$E_{nl}=-V_0+\sqrt{\frac{2V_0}{Ma_0{}^2}}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{2Ma_0{}^2}+\cdots \qquad \text{ⓝ}$$

ⓖ, ⓗと比べると, ⓝの右辺第2項が振動エネルギー, 第3項が回転エネルギーになっていることが明らかである.

[3]　(1) 粒子数密度が n であるような自由電子ガスの基底状態を考える. 電子の運動量の最大値 p_0(Fermi 運動量)は,

$$p_0=\hbar(3\pi^2n)^{\frac{1}{3}} \qquad \text{①}$$

で与えられることを示せ.

(2) Z が大きな原子では電子の数も大きいので, 原子核のまわりの空間の各点における電子数密度 $n(\boldsymbol{r})$ は十分大きい. すなわち, 電子は各点のまわりで, 密度 $n(\boldsymbol{r})$ の

自由電子ガスのように分布していると近似してよい．静電ポテンシャルを $\varphi(\boldsymbol{r})$ としたとき，

$$\Delta\varphi=4\pi Ze\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})-4\pi en(\boldsymbol{r}) \tag{②}$$

および，

$$\frac{p_0(\boldsymbol{r})^2}{2m}+e\varphi(\boldsymbol{r})=0 \tag{③}$$

をみたすことを示せ．ここで，$p_0(\boldsymbol{r})$ は $n(\boldsymbol{r})$ に対応する Fermi 運動量

$$p_0(\boldsymbol{r})=\hbar(3\pi^2 n(\boldsymbol{r}))^{\frac{1}{3}} \tag{④}$$

である．

(3) ②，③，④より，原点以外で $\varphi(\boldsymbol{r})$ がみたす方程式

$$\Delta\varphi=-\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar}\right)^3 e(-e\varphi)^{\frac{3}{2}} \tag{⑤}$$

を導け．これは Thomas-Fermi の方程式とよばれる．これが中性原子を表すためには，どのような境界条件をみたす解を考えるべきか．

(4) Z が大きいとき，全イオン化エネルギーが $Z^{\frac{7}{3}}$ に比例することを示せ．

(5) (2)で導入したような近似は，原子核のまわりのどのあたりでよい近似になっているか．

［解］ (1) 体積 V の箱に入っている電子を考えたとき，運動量が $\boldsymbol{p}$ の付近にあるような状態の数は，

$$2\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}Vd^3p$$

で与えられる．ここで全体の因子 2 はスピンの自由度である．よって，運動量の大きさが p_0 以下であるような状態の数は，

$$N=2\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}V\cdot\frac{4\pi}{3}p_0{}^3=V\cdot\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^3$$

である．それらの状態に電子をつめると，電子数密度は，

$$n=\frac{N}{V}=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^3$$

となり，これから①が導かれる．

(2) 原子核および電子のつくる電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ は，

$$\rho(\boldsymbol{r})=-Ze\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})+en(\boldsymbol{r})$$

である（ここでは，電子の電荷を e としている）．(2)は，Poisson の方程式，$\Delta\varphi=-4\pi\rho$ にほかならない．

Z が十分に大きくて，電子が各点のまわりで自由電子ガスのようにあつかえ

るとする．このとき，各点での電子の最大エネルギー $\varepsilon_0(\boldsymbol{r})$ は，

$$\varepsilon_0(\boldsymbol{r})=\frac{p_0(\boldsymbol{r})^2}{2m}+e\varphi(\boldsymbol{r})$$

であるが，これがもし $\boldsymbol{r}$ に依存しているならば，電子は $\varepsilon_0(\boldsymbol{r})$ の大きいところから小さいところへ移動するであろう．よって基底状態では $\varepsilon_0(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ に依存しないはずである．中性の原子では，$|\boldsymbol{r}|\to\infty$ で $n(\boldsymbol{r})$ も $\varphi(\boldsymbol{r})$ もゼロになるから，$\varepsilon_0(\boldsymbol{r})=0$ である．よって，③が得られる．

(3) ④で与えられる $p_0(\boldsymbol{r})$ を③に代入して変形すると，

$$n(\boldsymbol{r})=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)^3(-e\varphi)^{\frac{3}{2}} \qquad ⓐ$$

が得られる．ここで，$n(\boldsymbol{r})$ は数密度だからいたるところ正かゼロであり，$e\varphi$ は中性原子内の電子が感じるポテンシャルエネルギーだからいたるところ負かゼロであることに注意しよう．ⓐを②に代入すると，$\boldsymbol{r}\neq\boldsymbol{0}$ で⑤が得られる．

$\varphi(\boldsymbol{r})$ は原子内の静電ポテンシャルであるから，境界条件として，

$$\varphi(\boldsymbol{r})\sim\begin{cases}-\dfrac{Ze}{r} & (r\sim 0)\\[2mm] 0 & (r\to\infty)\end{cases} \qquad ⓑ$$

をみたすべきである．また，上に述べたことから，$-e\varphi(\boldsymbol{r})$ はいたるところ正かゼロであるべきである．

(4) いろいろな定数に対する依存性を見通しよくするために，

$$\boldsymbol{r}=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\hbar^2}{me^2}Z^{-\frac{1}{3}}\boldsymbol{x} \qquad ⓒ$$

$$-e\varphi=2\left(\frac{4}{3\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{me^4}{\hbar^2}Z^{\frac{4}{3}}\eta \qquad ⓓ$$

とおくと，φ に対する方程式と境界条件(⑤とⓑ)は，

$$\Delta_{\boldsymbol{x}}\eta=\eta^{\frac{3}{2}} \qquad ⓔ$$

$$\eta(\boldsymbol{x})\sim\begin{cases}\dfrac{1}{|\boldsymbol{x}|} & (|\boldsymbol{x}|\sim 0)\\[2mm] 0 & (|\boldsymbol{x}|\to\infty)\end{cases} \qquad ⓕ$$

と書きなおせる．ここで，$\Delta_{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{x}$ に関するラプラシアン $\dfrac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2}$ のことである．

ⓔ，ⓕは m，$\hbar$ のみならず Z をも含まない式であり，いたるところ正かゼロであるような解は一意的である．このことから，Z が十分に大きい原子の漸近的なふるまいを読みとることができる．実際，ⓒの Z 依存性から，原子核から電

子への平均距離は $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例することがわかり，そのような Z 個の電子と原子核の間の全静電エネルギーは，

$$Z^2\cdot\frac{1}{Z^{-\frac{1}{3}}}=Z^{\frac{7}{3}}$$

に比例することがわかる．ビリアル定理によれば，全エネルギーは全ポテンシャルエネルギーの $\frac{1}{2}$ であるから，けっきょく全イオン化エネルギーは $Z^{\frac{7}{3}}$ に比例することがわかる．

(5) (2)で導入した近似がよいのは，自由電子ガスの平均的な波長の程度では，$p_0(\boldsymbol{r})$ がほとんど変化しないとみなせるときである．その条件は，

$$\frac{\hbar}{p_0(\boldsymbol{r})}\cdot\left|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\log p_0(\boldsymbol{r})\right|\ll 1$$

であるが，これは③を使って，

$$\left|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\log\Bigl(-e\varphi(\boldsymbol{r})\Bigr)\right|\ll\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\Bigl(-e\varphi(\boldsymbol{r})\Bigr)^{\frac{1}{2}} \qquad ⓖ$$

と表すことができる．

原点のそばでは，ⓑより，

$$-e\varphi(\boldsymbol{r})\sim\frac{Ze^2}{r}$$

であるから，ⓖは，

$$\left|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\log\frac{Ze^2}{r}\right|\ll\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left(\frac{Ze^2}{r}\right)^{\frac{1}{2}}$$

すなわち，

$$r\gg\frac{\hbar^2}{me^2}Z^{-1}$$

を表している．

一方，$r\to\infty$ では，⑤の解は，

$$-e\varphi\sim\frac{81\pi^2}{8}\left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^3\frac{1}{e^4}\frac{1}{r^4}\quad(r\to\infty)$$

のようにふるまうことが $-e\varphi(\boldsymbol{r})\sim cr^{-s}$ の形を⑤に代入してみることによって示すことができる．これをⓖに代入してみると，r が大きいところでは，ⓖは，

$$r\ll\frac{\hbar^2}{me^2}$$

を表していることがわかる．

けっきょく，Thomas-Fermi の方程式は，

$$\frac{\hbar^2}{me^2}Z^{-1} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{me^2} \qquad ⓗ$$

であるような距離ではよい近似であることがわかった．ところが，(4)のところでみたように，ほとんどの電子は原子核からの距離が $\frac{\hbar^2}{me^2}Z^{-\frac{1}{3}}$ 程度のところにあるから，Z が十分大きな原子は，Thomas-Fermi 方程式でよく近似できる．

[4] (1) 電荷 $-Ze$ の原子核のまわりを運動する N 個の電子に対するハミルトニアンを1体部分と2体部分にわけて，

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r}_i|}\right)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i - \hat{\boldsymbol{r}}_j|}$$

と書こう．系の波動関数としては，1体の波動関数の積を反対称化したもの

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \boldsymbol{r}_2, s_2; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_1(\boldsymbol{r}_1, s_1) & \varphi_1(\boldsymbol{r}_2, s_2)\cdots & \varphi_1(\boldsymbol{r}_N, s_N) \\ \varphi_2(\boldsymbol{r}_1, s_1) & \varphi_2(\boldsymbol{r}_2, s_2)\cdots & \varphi_2(\boldsymbol{r}_N, s_N) \\ \vdots & & \\ \varphi_N(\boldsymbol{r}_1, s_1) & \varphi_N(\boldsymbol{r}_2, s_2)\cdots & \varphi_N(\boldsymbol{r}_N, s_N) \end{vmatrix} \qquad ①$$

を考えよう．ここで，$\boldsymbol{r}_i$，s_i は i 番目の電子の位置およびスピンの z 成分である．また，1体の波動関数 $\varphi_i(\boldsymbol{r}, s)$ $(i=1, 2, \cdots, N)$ はたがいに正規直交であるとする．すなわち，

$$\sum_s \int d^3r \varphi_i^*(\boldsymbol{r}, s)\varphi_j(\boldsymbol{r}, s) = \delta_{ij}$$

この状態における $\hat{H}_1$ および $\hat{H}_2$ の期待値は，

$$\langle\hat{H}_1\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_s \int d^3r \varphi_i^*(\boldsymbol{r}, s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}\right)\varphi_i(\boldsymbol{r}, s) \qquad ②$$

$$\langle\hat{H}_2\rangle = \sum_{i<j}\sum_{s,s'}\int d^3r\, d^3r' \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot$$
$$\cdot(|\varphi_i(\boldsymbol{r}, s)|^2|\varphi_j(\boldsymbol{r}', s')|^2 - \varphi_i^*(\boldsymbol{r}, s)\varphi_i(\boldsymbol{r}', s')\varphi_j^*(\boldsymbol{r}', s')\varphi_j(\boldsymbol{r}, s)) \qquad ③$$

と書けることを示せ．

(2) 変分原理に従って，①で与えられた波動関数による $\hat{H}$ の期待値 $\langle\hat{H}_1\rangle + \langle\hat{H}_2\rangle$ を最小にするように $\varphi_i(\boldsymbol{r}, s)$ $(i=1, 2, \cdots, N)$ を選ぶと，これらは，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}\right)\varphi_i(\boldsymbol{r}, s)$$

$$+\sum_{s'}\int d^3r'\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\sum_{j(\neq i)}\varphi_j^*(\boldsymbol{r}',s')[\varphi_j(\boldsymbol{r}',s')\varphi_i(\boldsymbol{r},s)$$
$$-\varphi_j(\boldsymbol{r},s)\varphi_i(\boldsymbol{r}',s')]$$
$$=\varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{r},s) \qquad ④$$

をみたすことを示せ．ここで，ε_i は実数である．これを Hartree-Fock 方程式とよぶ．

(3) ε_i は近似的に，基底状態から状態 φ_i にある電子をとり除くのに要するイオン化エネルギーと解釈できることを示せ．

［解］ (1) (i) $\varphi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N)$ は，粒子の入れかえに対して完全反対称であるから，

$$\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^{\,2}}{2m}-\frac{Ze^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i|}$$

の期待値は i によらない．よって，

$$\langle\hat{H}_1\rangle=\left\langle\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^{\,2}}{2m}-\frac{Ze^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i|}\right)\right\rangle$$
$$=N\left\langle\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_1^{\,2}}{2m}-\frac{Ze^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1|}\right)\right\rangle \qquad ⓐ$$

と書ける．

波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N)$ を $\boldsymbol{r}_1$, s_1 に対する依存性がみやすくなるように，

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\varphi_i(\boldsymbol{r}_1, s_1)\xi_i(\boldsymbol{r}_2, s_2; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N) \qquad ⓑ$$

と書きかえよう．これは，①の右辺の行列式を，第 1 列について展開したものであり，ξ_i $(i=1,\ 2,\ \cdots,\ N)$ は，i 行と 1 列をとり除いた小行列式である．すなわち，

$$\xi_i(\boldsymbol{r}_2, s_2; \cdots; \boldsymbol{r}_N, s_N)=\frac{(-1)^{i-1}}{\sqrt{(N-1)!}}\begin{vmatrix}\varphi_1(\boldsymbol{r}_2,s_2) & \cdots & \varphi_1(\boldsymbol{r}_N,s_N)\\ \vdots & & \vdots\\ \varphi_{i-1}(\boldsymbol{r}_2,s_2) & \cdots & \varphi_{i-1}(\boldsymbol{r}_N,s_N)\\ \varphi_{i+1}(\boldsymbol{r}_2,s_2) & \cdots & \varphi_{i+1}(\boldsymbol{r}_N,s_N)\\ \vdots & & \vdots\\ \varphi_N(\boldsymbol{r}_2,s_2) & \cdots & \varphi_N(\boldsymbol{r}_N,s_N)\end{vmatrix}$$

ξ_i は，$(N-1)$ 個の状態 φ_1，φ_2，$\cdots$，φ_{i-1}，φ_{i+1}，$\cdots$，φ_N に $N-1$ 個の電子をつめたような状態であるから，明らかに正規直交である．すなわち，

$$\sum_{s_2,\cdots,s_N}\int d^3r_2\cdots d^3r_N\ \xi_i^*(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)\xi_j(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)$$
$$=\delta_{ij} \qquad ⓒ$$

ⓐとⓑより，

$$\langle\hat{H}_1\rangle=N\sum_{s_1,\cdots,s_N}\int d^3r_1\cdots d^3r_N\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\varphi_i^*(\boldsymbol{r}_1, s_1)\xi_i^*(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)\right)\cdot$$
$$\cdot\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_1{}^2}-\frac{Ze^2}{r_1}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\varphi_j(\boldsymbol{r}_1, s_1)\xi_j(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)\right)$$
$$=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left[\sum_{s_1}\int d^3r_1\varphi_i^*(\boldsymbol{r}_1, s_1)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_1{}^2}-\frac{Ze^2}{r_1}\right)\varphi_j(\boldsymbol{r}_1, s_1)\right]\cdot$$
$$\cdot\left[\sum_{s_2,\cdots,s_N}\int d^3r_2\cdots d^3r_N\xi_i^*(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)\xi_j(\boldsymbol{r}_2, s_2\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)\right]$$

が得られるが，最後の式の第２因子はⓒより δ_{ij} に等しいから，②が得られる．

(ii) ２体の演算子 $\hat{H}_2$ の期待値も同様に計算できる．まず，$\varphi(\boldsymbol{r}_1,\ s_1\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N,\ s_N)$ の完全反対称性から，

$$\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i-\hat{\boldsymbol{r}}_j|}\quad(i\neq j)$$

の期待値は i，j によらないことがわかり，

$$\langle\hat{H}_2\rangle=\frac{N(N-1)}{2}\quad\left\langle\frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2|}\right\rangle \qquad ⓓ$$

と書けることがわかる．

波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1,\ s_1\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N,\ s_N)$ の $\boldsymbol{r}_1$，s_1 および $\boldsymbol{r}_2$，s_2 に対する依存性をみやすくするために，①の右辺の行列式を，第１列および第２列に関して展開しよう．

$$\varphi(\boldsymbol{r}_1, s_1\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{\frac{N(N-1)}{2}}}\sum_{i<j}\varphi_{ij}(\boldsymbol{r}_1, s_1\ ;\ \boldsymbol{r}_2, s_2)\xi_{ij}(\boldsymbol{r}_3, s_3\ ;\ \cdots\ ;\ \boldsymbol{r}_N, s_N) \qquad ⓔ$$

ここで，$\varphi_{ij}(1\leqq i\leqq j\leqq N)$ は２行２列の行列式

$$\varphi_{ij}(\boldsymbol{r}_1, s_1\ ;\ \boldsymbol{r}_2, s_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\varphi_i(\boldsymbol{r}_1, s_1) & \varphi_i(\boldsymbol{r}_2, s_2)\\ \varphi_j(\boldsymbol{r}_1, s_1) & \varphi_j(\boldsymbol{r}_2, s_2)\end{vmatrix} \qquad ⓕ$$

であり，ξ_{ij} $(1\leqq i\leqq j\leqq N)$ は，①の右辺の行列から第１列，第２列および第 i 行，第 j 行をとり除いた小行列式である．すなわち，

$$\xi_{ij}(\boldsymbol{r}_3, s_3\,;\cdots;\boldsymbol{r}_N, s_N)=\frac{(-1)^{i+j-1}}{\sqrt{(N-2)!}}\begin{vmatrix}\varphi_1(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_1(\boldsymbol{r}_N, s_N)\\ \vdots \qquad\qquad \vdots\\ \varphi_{i-1}(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_{i-1}(\boldsymbol{r}_N, s_N)\\ \varphi_{i+1}(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_{i+1}(\boldsymbol{r}_N, s_N)\\ \vdots \qquad\qquad \vdots\\ \varphi_{j-1}(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_{j-1}(\boldsymbol{r}_N, s_N)\\ \varphi_{j+1}(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_{j+1}(\boldsymbol{r}_N, s_N)\\ \vdots \qquad\qquad \vdots\\ \varphi_N(\boldsymbol{r}_3, s_3)\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_N, s_N)\end{vmatrix}$$

ξ_{ij} は，$N-2$ 個の電子を $N-2$ 個の状態 $\varphi_1, \cdots, \varphi_{i-1}, \varphi_{i+1}, \cdots, \varphi_{j-1}, \varphi_{j+1}, \cdots, \varphi_N$ につめたような状態であるから，明らかに正規直交である．すなわち，

$$\sum_{s_3,\cdots,s_N}\int d^3r_3\cdots d^3r_N\xi_{ij}^*\xi_{kl}=\delta_{ik}\delta_{jl} \qquad ⓖ$$

ⓓとⓔより，

$$\langle\hat{H}_2\rangle=\frac{N(N-1)}{2}\sum_{s_1,\cdots,s_N}\int d^3r_1\cdots d^3r_N\left(\frac{1}{\sqrt{\frac{N(N-1)}{2}}}\sum_{i<j}\varphi_{ij}^*\xi_{ij}^*\right)\cdot$$

$$\cdot\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\left(\frac{1}{\sqrt{\frac{N(N-1)}{2}}}\sum_{k<l}\varphi_{kl}\xi_{kl}\right)$$

$$=\sum_{i<j}\sum_{k<l}\left[\sum_{s_1,s_2}\int d^3r_1d^3r_2\;\varphi_{ij}^*\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\varphi_{kl}\right]\cdot$$

$$\cdot\left[\sum_{s_3,\cdots,s_N}\int d^3r_3\cdots d^3r_N\xi_{ij}^*\xi_{kl}\right]$$

となるが，最後の式の第2因子はⓖより $\delta_{ik}\delta_{jl}$ に等しいから，けっきょく

$$\langle\hat{H}_2\rangle=\sum_{i<j}\sum_{s_1,s_2}\int d^3r_1d^3r_2\;\varphi_{ij}^*\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\varphi_{ij}$$

と書ける．これにⓕより得られる式

$$\varphi_{ij}(\boldsymbol{r}_1, s_1\,;\boldsymbol{r}_2, s_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_i(\boldsymbol{r}_1, s_1)\varphi_j(\boldsymbol{r}_2, s_2)-\varphi_j(\boldsymbol{r}_1, s_1)\varphi_i(\boldsymbol{r}_2, s_2))$$

を代入すると，③が得られる．

(2) ②, ③から，φ_i を微小に変化させて $\varphi_i+\delta\varphi_i$ にしたときに $\langle\hat{H}_1\rangle$ および $\langle\hat{H}_2\rangle$ がどれだけ変化するかを計算すると，

$$\delta\langle\hat{H}_1\rangle=2\mathrm{Re}\sum_s\int d^3r\delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{Ze^2}{r}\right)\varphi_i(\boldsymbol{r},s)$$

$$\delta\langle\hat{H}_2\rangle=2\mathrm{Re}\sum_s\int d^3r\delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)\sum_{s'}\int d^3r'\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot$$
$$\cdot\sum_{j(\neq i)}(\varphi_i(\boldsymbol{r},s)|\varphi_j(\boldsymbol{r}',s')|^2-\varphi_i(\boldsymbol{r}',s')\varphi_j^*(\boldsymbol{r}',s')\varphi_j(\boldsymbol{r},s))$$

となることがわかる．

ところで，φ_i も $\varphi_i+\delta\varphi_i$ も 1 に規格化されているためには，$\delta\varphi_i$ は条件式

$$\mathrm{Re}\sum_s\int d^3r\ \delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)\varphi_i(\boldsymbol{r},s)=0$$

をみたさなければいけない．この条件を Lagrange の未定係数としてとり入れると，$\langle\hat{H}_1\rangle+\langle\hat{H}_2\rangle$ が最小となる条件は④であることがわかる．

(3) ④の両辺に $\varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)$ をかけて，$\boldsymbol{r}$ で積分し s で和をとると，

$$\varepsilon_i=\sum_s\int d^3r\ \varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{Ze^2}{r}\right)\varphi_i(\boldsymbol{r},s)$$
$$+\sum_{s,s'}\int d^3r\ d^3r'\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\sum_{j(\neq i)}(|\varphi_i(\boldsymbol{r},s)|^2|\varphi_j(\boldsymbol{r}',s')|^2$$
$$-\varphi_i^*(\boldsymbol{r},s)\varphi_i(\boldsymbol{r}',s')\varphi_j^*(\boldsymbol{r}',s')\varphi_j(\boldsymbol{r},s))$$

となる．ところがこれは，②+③の右辺で，形式的に i 番目の状態を取り除いたときの $\langle\hat{H}_1\rangle+\langle\hat{H}_2\rangle$ の変化分に等しい．もちろん，実際のイオンでは 1 つの電子を取り除くと残りの電子の状態は変化するわけであるが，その効果を無視したときのエネルギー変化が ε_i であるわけである．

[5] 13.9 節で説明した $c\bar{c}$ 系のチャーモニウムと同様に，$b\bar{b}$ 系の束縛状態も非相対論的 Schrödinger 方程式で記述できるものとし，距離 r とともに増大する閉じ込めポテンシャル $V(r)=kr$ $(k>0)$ で束縛されているものと仮定しよう（もちろん，定数項をつけ加える自由度は存在するが簡単のためゼロとする）．

(1) いま，$l=0$ の状態を考え，エネルギー固有値を解析的に解き，励起状態（nS 状態）の質量を求めよ．

(2) $1S$，$2S$ 状態の質量，$M^{(1)}=9.460$ GeV，$M^{(2)}=10.023$ GeV を与えて，$M^{(3)}$，$M^{(4)}$ を計算し，実験値と比べてみよ．

[解] (13.60) において $l=0$，$V(r)=kr$ とおくと，b クォークの質量を m_b として，$\hbar=1$，$c=1$ のユニットで，

$$-\frac{1}{m_b}\frac{d^2(rR)}{dr^2}+(kr-E)rR=0 \qquad ⓐ$$

が得られる．いま，$x=r/a-\lambda$ という新しい変数に変換し，$rR(r)=\chi(x)$ を導

入すると,

$$-\frac{1}{m_b a^2}\frac{d^2\chi(x)}{dx^2}+(kax+ka\lambda-E)\chi(x)=0$$

を得る.

$$a^3=\frac{1}{km_b},\qquad \lambda=a^2 m_b E \qquad ⓑ$$

とおくと,

$$\frac{d^2\chi(x)}{dx^2}-x\chi(x)=0 \qquad ⓒ$$

の形になる.

一方, 固有関数は $r=0$ でゼロでなければならぬから,

$$\chi(-\lambda)=0 \qquad ⓓ$$

を要求する. また $\chi(\infty)=0$ でなければならない. この境界条件をみたすⓒの解は Airy 関数である(付録 C 参照).

$$\therefore\quad \chi(x)=CA_i(x) \qquad ⓔ$$

と書く. ⓑより $E=\lambda\left(\frac{k^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$ であるから, $A_i(-\lambda)=0$ の Airy 関数の根 λ_n を用いて, エネルギー固有値は,

$$E_n=\left(\frac{k^2}{m_b}\right)^{\frac{1}{3}}\lambda_n \qquad ⓕ$$

これらのエネルギーに $b\bar{b}$ 対の静止エネルギー $2\,m_b$ をつけ加えると,

$$M^{(n)}=2m_b+\left(\frac{k^2}{m_b}\right)^{\frac{1}{3}}\lambda_n \qquad ⓖ$$

となる.

(2) この模型では, m_b と k がパラメーターなので, $M^{(1)}$ と $M^{(2)}$ を与えれば決まる. Airy 関数の根, $\lambda_1=2.338$, $\lambda_2=4.088$ と $M^{(1)}=9.460$ GeV, $M^{(2)}=10.023$ GeV をⓖに代入して m_b と k を決めると, $m_b=4.354$ GeV, $k=0.381$ GeV^2 を得る. $\lambda_3=5.521$, $\lambda_4=6.787$ をⓖに代入すると,

$$\begin{aligned} M^{(3)}&=10.49\ \text{GeV}\qquad (実験値：10.35\ \text{GeV})\\ M^{(4)}&=10.89\ \text{GeV}\qquad (実験値：10.58\ \text{GeV})\end{aligned} \qquad ⓗ$$

となる.

第14章　電磁場の量子化

いままでの章ではもっぱら電磁場は外場とみなし，そのなかで運動する粒子系を考えてきたが，実際には電磁場の自由度も粒子の自由度と同様に量子化してやらなければならない．その手はじめとして，14.1 節ではスカラー場を量子化すると，スピンがゼロのボソン系になることをみる．電磁場の量子化は基本的にはスカラーの場合と同様にできるが，ゲージ対称性のとりあつかいに少し注意が必要である．14.2 節では古典的な場合にゲージ対称性をうまく解釈して，物理的な真の自由度はよこ波だけであることを議論し，14.3 節でその量子化を行う．以下の節では電磁場と物質の相互作用をあつかう．まず，14.4 節でその相互作用を記述するハミルトニアンの形を調べ，14.5 節では光の吸収・放出に関する一般的な関係式を導く．最後に，原子やその他の系が光子を放出する確率の計算の具体例として，双極子輻射をとりあつかう．

14.1　スカラー場の量子化

電磁場の量子化を考える前に，簡単な例として，実スカラー場の量子化を議論しておこう．実スカラー場 $\phi(x)$ の作用として，Lorentz 変換に対して不変なつぎの形のものを考えよう．

$$
\begin{aligned}
S&=\int dtd^3x\mathscr{L}\\
\mathscr{L}&=\frac{c^2}{2}\eta^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi-\frac{1}{2}\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2\\
&=\frac{1}{2}\{\dot{\phi}^2-c^2(\nabla\phi)^2\}-\frac{1}{2}\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2
\end{aligned}
\tag{14.1}
$$

ここで，時間 t に光速 c をかけたものを x^0 とし，空間座標 $\boldsymbol{x}$ とまとめて $x^\mu(\mu=0,1,2,3)$ と書き，$\phi(x)$ は実数値をとるスカラー場としている．また，∂_μ は，$\partial_0=\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial}{\partial t}$，$\partial_i=\dfrac{\partial}{\partial x^i}$ をまとめて書いたものであり，$\eta^{\mu\nu}$ は，

$$
\eta^{\mu\nu}=\begin{cases}1 & \mu=\nu=0\text{ のとき}\\ -1 & \mu=\nu=1,\ 2,\ 3\text{ のとき}\\ 0 & \text{上の場合以外}\end{cases}
\tag{14.2}
$$

のことである．(14.1)を，

$$
\begin{aligned}
S&=\int dt\ L\\
L&=\int d^3x\left\{\frac{1}{2}\dot{\phi}(\boldsymbol{x})^2-\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\phi(\boldsymbol{x}))^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi(\boldsymbol{x})^2\right)\right\}
\end{aligned}
\tag{14.3}
$$

と書いて，N 自由度の調和振動子のラグランジアン

$$
L_{\mathrm{H.O.}}=\sum_{i=1}^{N}\frac{m_i}{2}\dot{q}_i{}^2-\sum_{i,j}\frac{1}{2}K_{ij}q_iq_j
\tag{14.4}
$$

と比べてみよう．そうすると，つぎのような対応があることがわかるだろう．

$$q_i\leftrightarrow\phi(\boldsymbol{x}) \tag{14.5a}$$

$$\sum_i\leftrightarrow\int d^3x \tag{14.5b}$$

$$\sum_i\frac{m_i}{2}\dot{q}_i{}^2\leftrightarrow\int d^3x\frac{1}{2}\dot{\phi}^2 \tag{14.5c}$$

$$\sum_{i,j}\frac{1}{2}K_{ij}q_iq_j\leftrightarrow\int d^3x\frac{1}{2}\left\{c^2(\nabla\phi)^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2\right\} \tag{14.5d}$$

すなわち，力学変数 q が添字 i でラベルされていたのと同様に，力学変数 ϕ が連続

の添字 $\boldsymbol{x}$ でラベルされているとみなすと，いま考えている系(14.1)は無限自由度の調和振動子にほかならないことがわかる.

(14.4)のように自由度が有限であり，力学変数が離散的な添字 i でラベルされている場合は，正準共役量は，

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=m_i\dot{q}_i \quad (i=1,2,\cdots,N) \tag{14.6a}$$

で定義され，正準交換関係は，

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{14.6b}$$
$$[\hat{q}_i,\hat{q}_j]=[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0$$

となり，ハミルトニアンは，

$$H=\sum_{i=1}^{N}p_i\dot{q}_i-L=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m_i}+\sum_{i,j}\frac{1}{2}K_{ij}q_iq_j \tag{14.6c}$$

と書けたわけであるが，(14.3)のように力学変数が連続な添字 $\boldsymbol{x}$ でラベルされている場合はどうすればよいだろうか．まず，直観的な見方として，空間を格子間隔 a の格子に分割し，$\phi(\boldsymbol{x})$ のかわりに各格子点 i で定義された変数 ϕ_i を考えよう．そうすると，(14.3)で運動エネルギーに対応する部分(14.5c)は，

$$L_{\mathrm{K}}=\int d^3x\ \frac{1}{2}\dot{\phi}(\boldsymbol{x})^2\simeq\sum_{\text{格子点}\, i}a^3\frac{1}{2}\dot{\phi}_i^2 \tag{14.7}$$

のように書けるだろう．そうすると，ϕ_i の正準共役量は，

$$p_i=\frac{\partial L_{\mathrm{K}}}{\partial\dot{\phi}_i}=a^3\dot{\phi}_i \tag{14.8a}$$

であり，正準交換関係は，

$$[\hat{\phi}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$$
$$[\hat{\phi}_i,\hat{\phi}_j]=[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0 \tag{14.8b}$$

となり，ハミルトニアンの運動エネルギーの部分は，

$$H_{\mathrm{K}}=\sum_{\text{格子点}\, i}p_i\dot{\phi}_i-L_{\mathrm{K}}=\sum_{\text{格子点}\, i}\frac{1}{2}\frac{1}{a^3}p_i^2 \tag{14.8c}$$

で与えられる．これをみやすくするために，p_i のかわりに，

$$\pi_i=\frac{1}{a^3}p_i=\dot{\phi}_i \tag{14.9a}$$

という変数を導入しよう．そうすると，(14.8b)は，

$$[\hat{\phi}_i,\hat{\pi}_j]=i\hbar\frac{1}{a^3}\delta_{ij}$$
$$[\hat{\phi}_i,\hat{\phi}_j]=[\hat{\pi}_i,\hat{\pi}_j]=0 \tag{14.9b}$$

となり，(14.8c)は，

$$H_K=\sum_{\text{格子点}\,i} a^3\frac{1}{2}\pi_i{}^2 \tag{14.9c}$$

と書ける．ここで，$\phi(\boldsymbol{x})$ から ϕ_i へ移行したのを逆にたどって π_i から $\pi(\boldsymbol{x})$ へ移行しよう．すなわち，π_i とは連続な空間 $\boldsymbol{x}$ 上の場 $\pi(\boldsymbol{x})$ を格子上で表したものと考える．そうすると，(14.9 a) は，

$$\pi(\boldsymbol{x})=\dot{\phi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.10a}$$

を表していることになり，(14.9b) は，

$$\begin{aligned}&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\phi}(\boldsymbol{y})]=[\hat{\pi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=0\end{aligned} \tag{14.10b}$$

となり，(14.9c) は，

$$H_K=\int d^3x\ \frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x})^2 \tag{14.10c}$$

と書けることがわかる．

汎関数微分

場に対する正準共役量をもう少しまとまった形で表現するために，汎関数微分を定義しておこう．まず，多変数 q_i $(i=1, 2, \cdots, N)$ の関数 $f(q)$ に対する偏微分の定義を思い出そう．変数を q_i から $q_i+\delta q_i$ $(i=1, 2, \cdots, N)$ に変えたときの変化分が，

$$\delta f=f(q+\delta q)-f(q)=\sum_i c_i(q)\delta q_i+O((\delta q)^2) \tag{14.11}$$

のように書けるとき，右辺の δq_i の係数 c_i を $\dfrac{\partial f}{\partial q_i}$ と書き，偏微分とよぶのであった．

これとまったく同様にして，関数 $\varphi(x)$ の汎関数 $F[\varphi]$ に対し，汎関数微分をつぎのようにして定義する．$\varphi(x)$ を $\varphi(x)+\delta\varphi(x)$ に変えたときの変化分が，

$$\begin{aligned}\delta F&=F[\varphi+\delta\varphi]-F[\varphi]\\&=\int dx c_x[\varphi]\delta\varphi(x)+O((\delta\varphi)^2)\end{aligned} \tag{14.12}$$

のように書けるとき，右辺の $\delta\varphi(x)$ の係数 $c_x[\varphi]$ を $\dfrac{\delta F}{\delta\varphi(x)}$ と書き，F の φ による汎関数微分とよぶ．

汎関数微分を使うと，場の正準共役量は，

$$\pi(\boldsymbol{x})=\frac{\delta L}{\delta\dot{\varphi}(\boldsymbol{x})} \tag{14.13a}$$

と書け，正準交換関係およびハミルトニアンは，

$$\begin{aligned}&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\phi}(\boldsymbol{y})]=[\hat{\pi}(\boldsymbol{x}),\ \hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=0\end{aligned} \tag{14.13b}$$

$$H=\int d^3x\,\pi(\boldsymbol{x})\dot{\phi}(\boldsymbol{x})-L \tag{14.13c}$$

となり，有限自由度の場合との対応がわかりやすくなる．

例題 1 (14.3)で与えられるラグランジアンから，(14.13a)および(14.13c)によって定義される正準共役量およびハミルトニアンを求め，(14.10a)および(14.10c)と一致していることを確かめよ．

解 $L=\int d^3x\left\{\frac{1}{2}\dot{\phi}^2-\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\phi)^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2\right)\right\}$ において $\dot{\phi}$ と ϕ を独立変数とみなして，$\dot{\phi}$ を $\dot{\phi}+\delta\dot{\phi}$ に，ϕ を $\phi+\delta\phi$ に変化させたときの L の変化分は，

$$\begin{aligned}\delta L&=\int d^3x\left\{\frac{1}{2}(\dot{\phi}+\delta\dot{\phi})^2-\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\phi+\nabla\delta\phi)^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2(\phi+\delta\phi)^2\right)\right\}\\&\quad-\int d^3x\left\{\frac{1}{2}\dot{\phi}^2-\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\phi)^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2\right)\right\}\\&=\int d^3x\left\{\dot{\phi}\delta\dot{\phi}+\left(c^2\Delta\phi-\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi\right)\delta\phi\right\}+O(\delta\phi,\delta\dot{\phi}\text{ の 2 次})\end{aligned}$$

となるから，

$$\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}}=\dot{\phi},\quad\frac{\delta L}{\delta\phi}=c^2\Delta\phi-\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi$$

が得られる．よって，

$$\pi(\boldsymbol{x})=\frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\boldsymbol{x})}=\dot{\phi}(\boldsymbol{x})$$

となり，たしかに(14.10a)と一致している．またハミルトニアンは，

$$\begin{aligned}H&=\int d^3x\,\pi(\boldsymbol{x})\dot{\phi}(\boldsymbol{x})-L\\&=\int d^3x\left\{\frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x})^2+\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\phi)^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\phi^2\right)\right\}\end{aligned} \tag{14.14}$$

となり，運動エネルギーに対応する部分はたしかに(14.10c)と一致している．▮

運動量の演算子

いま考えている系(14.3)は，明らかに並進

$$\phi(\boldsymbol{x})\mapsto\phi'(\boldsymbol{x})=\phi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})$$

に対して不変であるから，この変換の生成子として運動量が保存するはずである．運動量の演算子の具体的な形を求めるために，ベクトル $\boldsymbol{a}$ だけ並進する演算子 $\hat{U}(\boldsymbol{a})$ を考えよう．すなわち，状態ベクトル $|\Psi\rangle$ を $\boldsymbol{a}$ だけ平行移動させたような状態ベクトルが $\hat{U}(\boldsymbol{a})|\Psi\rangle$ と書けるとしよう．

$$|\psi\rangle\xmapsto[\boldsymbol{a}\text{ だけ並進}]{}\hat{U}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle \tag{14.15}$$

このとき，場の量 $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$，$\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$ の期待値は，それぞれ，

$$\langle\psi|\hat{\phi}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle \longmapsto \langle\psi|\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\phi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle \tag{14.16a}$$

$$\langle\psi|\hat{\pi}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle \longmapsto \langle\psi|\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\pi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle \tag{14.16b}$$

のように変化するが，$\hat{U}(\boldsymbol{a})$ が $\boldsymbol{a}$ だけ並進する演算子であることから，これらはそれぞれ，

$$\langle\psi|\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\phi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{\phi}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})|\psi\rangle \tag{14.17a}$$

$$\langle\psi|\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\pi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{\pi}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})|\psi\rangle \tag{14.17b}$$

となっているはずである．よって，演算子の間の式として，

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\phi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})=\hat{\phi}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}) \tag{14.18a}$$

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{a})\hat{\pi}(\boldsymbol{x})\hat{U}(\boldsymbol{a})=\hat{\pi}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}) \tag{14.18b}$$

が成り立つべきであることがわかった．つぎに，

$$\hat{U}(\boldsymbol{a})=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\boldsymbol{a}\right)=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\boldsymbol{a}+O(\boldsymbol{a}^2) \tag{14.19}$$

として，(14.18) に代入し，両辺で $\boldsymbol{a}$ について1次の項を比べると，

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\phi}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.20a}$$

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\pi}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.20b}$$

が得られる．これをみたす $\hat{\boldsymbol{P}}$ は容易にみつけることができて，

$$\hat{\boldsymbol{P}}=-\int d^3x\,(\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.21}$$

とすればよいことがわかる．

例題2　ハミルトニアンが(14.14)で与えられるとき，運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{P}}$ が実際に保存していることをチェックせよ．

解　$\hat{\boldsymbol{P}}$ との交換子をとったとき2つの演算子 $\hat{A}(\boldsymbol{x})$，$\hat{B}(\boldsymbol{x})$ がともに，

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{A}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{A}(\boldsymbol{x}) \qquad ⓐ$$

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{B}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{B}(\boldsymbol{x}) \qquad ⓑ$$

の形をみたすならば，その和 $\hat{A}(\boldsymbol{x})+\hat{B}(\boldsymbol{x})$ および積 $\hat{A}(\boldsymbol{x})\hat{B}(\boldsymbol{x})$ も同様の式をみたす．

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{A}(\boldsymbol{x})+\hat{B}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla(\hat{A}(\boldsymbol{x})+\hat{B}(\boldsymbol{x}))$$

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{A}(\boldsymbol{x})\hat{B}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla(\hat{A}(\boldsymbol{x})\hat{B}(\boldsymbol{x}))$$

実際，第1式は自明であり，第2式も，

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{A}(\boldsymbol{x})\hat{B}(\boldsymbol{x})]&=[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{A}(\boldsymbol{x})]\hat{B}(\boldsymbol{x})+\hat{A}(\boldsymbol{x})[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{B}(\boldsymbol{x})]\\&=i\hbar(\nabla\hat{A}(\boldsymbol{x}))\hat{B}(\boldsymbol{x})+i\hbar\hat{A}(\boldsymbol{x})(\nabla\hat{B}(\boldsymbol{x}))\\&=i\hbar\nabla(\hat{A}(\boldsymbol{x})\hat{B}(\boldsymbol{x}))\end{aligned}$$

のようにして示される．また，ⓐの両辺を $\boldsymbol{x}$ で何回か微分すると，

$$\left[\hat{\boldsymbol{P}},\ \left(\frac{\partial}{\partial x^{i_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial x^{i_n}}\hat{A}(\boldsymbol{x})\right)\right]=i\hbar\nabla\left(\frac{\partial}{\partial x^{i_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial x^{i_n}}\hat{A}(\boldsymbol{x})\right)$$

となるから，$\hat{A}(\boldsymbol{x})$ を微分したものもやはり同じ形の式をみたす．よって，$\hat{O}(\boldsymbol{x})$ が局所的な演算子，すなわち $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$，$\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$，およびこれらの微分 $\frac{\partial}{\partial x^{i_1}}\cdots\cdots\frac{\partial}{\partial x^{i_n}}\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$，$\frac{\partial}{\partial x^{j_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial x^{j_m}}\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$ の多項式であれば，常に，

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{O}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{O}(\boldsymbol{x})$$

をみたす．ハミルトニアン $\hat{H}$ は局所的な演算子 $\hat{\mathscr{H}}(\boldsymbol{x})$ の積分の形

$$\hat{H}=\int d^3x\,\hat{\mathscr{H}}(\boldsymbol{x})$$

$$\hat{\mathscr{H}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\hat{\pi}(\boldsymbol{x})^2+\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\hat{\phi}(\boldsymbol{x})^2\right)$$

に書けているから，

$$[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{H}]=\int d^3x[\hat{\boldsymbol{P}},\ \hat{\mathscr{H}}(\boldsymbol{x})]=\int d^3x\,i\hbar\nabla\hat{\mathscr{H}}(\boldsymbol{x})=0$$

となる．　▮

実スカラー場のエネルギー準位

先の例題2でみたように，実スカラー場のハミルトニアン

$$\hat{H}=\int d^3x\left\{\frac{1}{2}\hat{\pi}(\boldsymbol{x})^2+\frac{1}{2}\left(c^2(\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\hat{\phi}(\boldsymbol{x})^2\right)\right\} \tag{14.22}$$

は，運動量の演算子

$$\hat{\boldsymbol{P}}=-\int d^3x(\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.21}$$

と可換であるから，これらを同時に対角化することを考えよう．まず，$\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$ を Fourier モードに分解する．

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x})=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}} \tag{14.23a}$$

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{x})=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}} \tag{14.23b}$$

いまは，実スカラー場を考えているから，$\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$ も $\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$ もエルミートであり，それに対応して Fourier モードは，

$$\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}=\hat{\phi}_{-\boldsymbol{k}} \tag{14.24a}$$

$$\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}=\hat{\pi}_{-\boldsymbol{k}} \tag{14.24b}$$

をみたさなければならない．(14.23)は逆に，

$$\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}}=\int d^3x\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.25a}$$

$$\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}}=\int d^3x\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \tag{14.25b}$$

とも書けるが，これを使うと正準交換関係

$$\begin{aligned}&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}),\hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\&[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}),\hat{\phi}(\boldsymbol{y})]=[\hat{\pi}(\boldsymbol{x}),\hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=0\end{aligned} \tag{14.26}$$

は，

$$\begin{aligned}&[\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}},\hat{\pi}_{\boldsymbol{l}}]=i\hbar(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l})\\&[\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}},\hat{\phi}_{\boldsymbol{l}}]=[\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}},\hat{\pi}_{\boldsymbol{l}}]=0\end{aligned} \tag{14.27}$$

となることがわかる．(14.23)を(14.22)および(14.21)に代入して少し計算すると，

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{2}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{k}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2}\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2\hat{\phi}_{-\boldsymbol{k}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}}\right) \tag{14.28}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,i\boldsymbol{k}\,\hat{\phi}_{-\boldsymbol{k}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}} \tag{14.29}$$

が得られる．ここで，$\omega_{\boldsymbol{k}}$ は，

$$\omega_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{c^2\boldsymbol{k}^2+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2} \tag{14.30}$$

で与えられる．(14.28)，(14.29)はほとんど対角化されているが，まだ波数 $\boldsymbol{k}$ のモードと $-\boldsymbol{k}$ のモードが混ざっている．さらに対角化をすすめるために，多少天下り的であるが，

$$\hat{\phi}_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger) \tag{14.31a}$$

$$\hat{\pi}_{\boldsymbol{k}}=-i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}-\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger) \tag{14.31b}$$

とおいてみよう．そうすると，まずエルミート性の条件(14.24)は自動的にみたされており，また交換関係(14.27)は，

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_{\boldsymbol{k}},\hat{a}_{\boldsymbol{l}}{}^\dagger]=(2\pi)^3\,\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l})\\&[\hat{a}_{\boldsymbol{k}},\ \hat{a}_{\boldsymbol{l}}]=[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger,\hat{a}_{\boldsymbol{l}}{}^\dagger]=0\end{aligned} \tag{14.32}$$

と等価であることがわかる．(14.31)を(14.28)に代入して被積分関数を整頓すると，

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{2}(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger) \tag{14.33a}$$

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{P}}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\boldsymbol{k}\bigg\{&\frac{1}{2}(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}}-\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{k}})\\&+\frac{1}{2}(-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger+\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}})\bigg\}\end{aligned} \tag{14.33b}$$

となるが，(14.33b)の右辺の括弧内の第2項 $\frac{1}{2}(-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger}+\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}})$ は積分変数 $\boldsymbol{k}$ を $-\boldsymbol{k}$ にかえてみればわかるように，$\boldsymbol{k}$ をかけて $\boldsymbol{k}$ で積分してしまえば寄与しない．さらに，形式的に，

$$\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger}=\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}+(2\pi)^3\,\delta^{(3)}(0) \tag{14.34}$$

と書いて，(14.33)を書きなおすと，

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+(2\pi)^3\,\delta^{(3)}(0)\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \tag{14.35a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\boldsymbol{k}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}-(2\pi)^3\delta^{(3)}(0)\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{k} \tag{14.35b}$$

となるが，(14.35b)の右辺第2項は，$\boldsymbol{k}$ を $-\boldsymbol{k}$ におきかえることにより符号が変わるから，ゼロベクトルであるとすべきであろう．一方，(14.35a)の右辺第2項は，無限個の調和振動子の零点振動のエネルギーを表している．これは，ハミルトニアンに定数をつけ加えているだけであるから，普通はおとしてもよい．けっきょく，エネルギーおよび運動量の表式として，

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} \tag{14.36a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\hbar\boldsymbol{k}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} \tag{14.36b}$$

が得られた．

(14.36a)は多自由度の調和振動子のハミルトニアンにほかならないから，基底状態を $|0\rangle$ と書くと，それは，

$$\hat{a}_{\boldsymbol{k}}|0\rangle=0 \qquad (\text{任意の } \boldsymbol{k} \text{ に対して}) \tag{14.37}$$

をみたす．また，調和振動子の場合と同様にエネルギーの固有状態は，$|0\rangle$ に生成演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}$ をつぎつぎに作用させることにより得られる．すなわち，状態空間は，

$$|\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2\cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle\equiv\hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}{}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}_2}{}^{\dagger}\cdots\hat{a}_{\boldsymbol{k}_n}{}^{\dagger}|0\rangle \tag{14.38}$$

によってはられており，これらの状態のエネルギー，および運動量の固有値は，

$$\hat{H}\,|\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \cdots \boldsymbol{k}_n\rangle=\hbar(\omega_{\boldsymbol{k}_1}+\cdots+\omega_{\boldsymbol{k}_n})|\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle$$
$$\hat{\boldsymbol{P}}\,|\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle=\hbar(\boldsymbol{k}_1+\cdots+\boldsymbol{k}_n)|\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle \tag{14.39}$$

で与えられる．とくに，(14.38)で $n=1$ の場合を考えると，

$$\hat{H}\,|\boldsymbol{k}\rangle=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{k}\rangle$$
$$\hat{\boldsymbol{P}}\,|\boldsymbol{k}\rangle=\hbar\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}\rangle$$
$$|\boldsymbol{k}\rangle=\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}|0\rangle \tag{14.40}$$

であり，$|\boldsymbol{k}\rangle$ は，エネルギーが $\varepsilon=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ で運動量が $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ であるような状態を表し

ていることがわかる．ここで，$\omega_{\boldsymbol{k}}$ の定義式(14.30)を思い出すと，

$$\varepsilon^2 - c^2\boldsymbol{p}^2 = (mc^2)^2 \tag{14.41}$$

となっており，$|\boldsymbol{k}\rangle$ は運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ質量 m の相対論的な粒子に対応していることがわかった．このように考えると，$|0\rangle$ は粒子が 1 つもない状態,すなわち真空を表しており，$|\boldsymbol{k}_1, \cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle = \hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}{}^\dagger \cdots \hat{a}_{\boldsymbol{k}_n}{}^\dagger |0\rangle$ は，n 個の粒子がある状態であると解釈できる．ところで，生成演算子どうしは可換であるから，1, 2, …, n の任意の置換 σ に対して，

$$|\boldsymbol{k}_1, \cdots, \boldsymbol{k}_n\rangle = |\boldsymbol{k}_{\sigma(1)}, \boldsymbol{k}_{\sigma(2)}, \cdots, \boldsymbol{k}_{\sigma(n)}\rangle \tag{14.42}$$

が成り立っていることに注意しよう．すなわち，いま考えている実スカラー場の状態空間は，相対論的なボソンの多体系を表していることがわかった．

Heisenberg 描像による場の演算子

ここまでの議論は，Schrödinger 描像によるものであったが，Heisenberg 描像ではどのようになるか考えてみよう．まず，(14.31)を(14.23)に代入すると，Schrödinger 描像における場の演算子は，

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\right) \tag{14.43a}$$

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(-i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\right) \tag{14.43b}$$

と表される．これらに対応する Heisenberg 表示での場の演算子は，

$$\hat{\phi}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{\phi}(\boldsymbol{x})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \tag{14.44a}$$

$$\hat{\pi}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{\pi}(\boldsymbol{x})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \tag{14.44b}$$

で与えられる．ここで，

$$\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^n \underbrace{[\hat{H}, \cdots[\hat{H}}_{n\text{ 個}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}]\cdots] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^n(-\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})^n\hat{a}_{\boldsymbol{k}} \\
&= \exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t)\hat{a}_{\boldsymbol{k}}
\end{aligned} \tag{14.45a}$$

および，このエルミート共役

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \exp(i\omega_{\boldsymbol{k}}t)\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger \tag{14.45b}$$

を使うと，(14.44)は，

$$\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\exp(i\omega_{\boldsymbol{k}}t-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\right) \tag{14.46a}$$

$$\hat{\pi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(-i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}\exp(i\omega_{\boldsymbol{k}}t-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}\right) \tag{14.46b}$$

と書けることがわかる．

(14.46a)からわかるように，Heisenberg 表示の場合の演算子 $\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)$ は，作用(14.1)から導かれる古典的な場の方程式

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial t^2}-c^2\Delta+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\right\}\phi(\boldsymbol{x},t)=0 \tag{14.47}$$

の平面波解 $\exp\{\pm(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\}$ の重ね合わせの形になっており，その係数が $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ や $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}$ になっている．よって，$\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)$ も(14.47)と同じ形の方程式

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial t^2}-c^2\Delta+\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\right\}\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=0 \tag{14.48}$$

をみたしている．(14.47)や(14.48)の形の方程式は，Klein-Gordon 方程式とよばれており，相対論的な粒子を表す場がみたす基礎的な方程式である．

例題 3　$\hat{P}_\mu$　($\mu=0,1,2,3$) を $\hat{P}_0=\frac{1}{c}\hat{H}$, $\hat{P}_i=-(\hat{\boldsymbol{P}}$ の i 成分) で定義し，$\partial_\mu(\mu=0,1,2,3)$ を $\partial_0=\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}$，$\partial_i=\frac{\partial}{\partial x^i}$ で定義すると，

$$\partial_\mu\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=\frac{i}{\hbar}[\hat{P}_\mu,\ \hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)]$$

となることを示せ．

解　$\hat{\phi}_{\rm H}$ に対する Heisenberg 方程式は，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=[\hat{H},\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)]$$

であり，運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{P}}$ は $\hat{H}$ と可換だから，(14.44a)と(14.20a)より，

$$i\hbar\nabla\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)=[\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\phi}_{\rm H}(\boldsymbol{x},t)]$$

が得られる．これらをまとめて書くと，求める式が得られる．∎

［問題 1］　場の演算子 $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$ が，正準交換関係

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}),\hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$$
$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}),\hat{\phi}(\boldsymbol{y})]=[\hat{\pi}(\boldsymbol{x}),\hat{\pi}(\boldsymbol{y})]=0$$

をみたしているとき，角運動量の演算子は，

$$\hat{\boldsymbol{L}}=-\int(\boldsymbol{x}\times\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))\hat{\pi}(\boldsymbol{x})\ d^3x \qquad ①$$

で与えられることを示せ．

［解］　角運動量の演算子を $\hat{\boldsymbol{L}}$ とすると，運動量のとき(14.18)を得たのと同様に，

$$e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}\hat{\phi}(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}=\exp\left\{i\boldsymbol{\theta}\cdot\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{x}\times\nabla)\right\}\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$$

$$e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}\hat{\pi}(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}=\exp\left\{i\boldsymbol{\theta}\cdot\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{x}\times\nabla)\right\}\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$$

をみたしていなければならない．$\boldsymbol{\theta}$ が無限小のときは，両辺で $\boldsymbol{\theta}$ に関して1次の部分をとって，

$$[\hat{\boldsymbol{L}},\hat{\phi}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$$

$$[\hat{\boldsymbol{L}},\hat{\pi}(\boldsymbol{x})]=i\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$$

となる．①で定義される $\hat{\boldsymbol{L}}$ がこれをみたしているのはすぐに確かめられる．　∎

14.2　電磁場の自由度

ゲージ固定

電磁場の量子化を議論する準備として，電磁場の自由度について古典論的に考えておこう．電磁場の作用は，

$$S=\int dt\int d^3x\ \mathscr{L}$$

$$\mathscr{L}=-\frac{1}{16\pi}\eta^{\mu\nu}\eta^{\alpha\beta}F_{\mu\alpha}F_{\nu\beta}-\frac{1}{c}j^\mu A_\mu \qquad (14.49)$$

で与えられる[1]．ここで，$F_{\mu\nu}$ は場の強さであり，4元ポテンシャル A_μ を使って，

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu \qquad (14.50)$$

で定義されている．j^μ は物質のつくる4元電流密度であり，その成分の意味は，

$$j^0=(\text{電荷密度}\ \rho)\times c$$

$$j^i=(\text{電流密度}\ \boldsymbol{j}\ \text{の}\ i\ \text{成分}) \qquad (14.51)$$

である．ここでは，j^μ は保存していると仮定する．

$$\partial_\mu j^\mu=\frac{\partial}{\partial t}\rho+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \qquad (14.52)$$

1)　ここではＣＧＳGauss単位を用いる．たとえば，ランダウ=リフシッツ，理論物理学教程 場の古典論，第4章，東京図書をみよ．

例題 1 (14.49)の作用に対する Euler-Lagrange 方程式がたしかに Maxwell の方程式

$$\frac{1}{4\pi}\partial^{\mu}F_{\mu\nu}=\frac{1}{c}j_{\nu}$$

になっていることを示せ.

解

$$\delta S=\delta\int dt\ d^3x\left(-\frac{1}{16\pi}\eta^{\mu\alpha}\eta^{\nu\beta}F_{\mu\nu}F_{\alpha\beta}-\frac{1}{c}j^{\nu}A_{\nu}\right)$$

$$=\int dt\ d^3x\left\{-\frac{1}{4\pi}\eta^{\mu\alpha}\eta^{\nu\beta}(\partial_{\mu}\delta A_{\nu})F_{\alpha\beta}-\frac{1}{c}j^{\nu}\delta A_{\nu}\right\}$$

$$=\int dt\ d^3x\left(\frac{1}{4\pi}\eta^{\mu\alpha}\eta^{\nu\beta}\partial_{\mu}F_{\alpha\beta}-\frac{1}{c}j^{\nu}\right)\delta A_{\nu}+(\text{表面項})$$

となるから, $\delta S=0$ より, たしかに,

$$\frac{1}{4\pi}\eta^{\mu\alpha}\eta^{\nu\beta}\partial_{\mu}F_{\alpha\beta}=\frac{1}{c}j^{\nu}$$

を得る. ∎

電磁場の作用(14.49)は 4 元ベクトル場 $A_{\mu}(x)$ の汎関数であるが, 明らかにゲージ変換

$$A_{\mu}\mapsto A_{\mu}+\partial_{\mu}\chi \tag{14.53}$$

に対して不変である. ここで, $\chi(x)$ は時空の無限遠方ではゼロになるような任意の関数である. 実際, $F_{\mu\nu}$ はその定義(14.50)から明らかなように, ゲージ変換(14.53)に対して不変であるし, (14.49)の右辺第 2 項の寄与は, ゲージ変換に対して,

$$-\int d^4x\ j^{\mu}A_{\mu}\mapsto-\int d^4x\ j^{\mu}A_{\mu}-\int d^4x\ j^{\mu}\partial_{\mu}\chi$$

$$=-\int d^4x\ j^{\mu}A_{\mu}+\int d^4x(\partial_{\mu}j^{\mu})\chi$$

$$=-\int d^4x\ j^{\mu}A_{\mu} \tag{14.54}$$

となり, たしかに不変である. ここで, 最後の変形では, 電荷の保存則(14.52)を使った. ゲージ不変性は, 作用(14.49)がもつ形式的な不変性であるが, 物理的には, $A_{\mu}(x)$ と $A_{\mu}(x)+\partial_{\mu}\chi(x)$ が表している系の状態の時間発展がまったく同じものであると解釈することにしよう. すなわち, 最小作用の原理では系の仮想的な時間発展を考えるわけであるが, いまの場合は, 1 つの仮想的な時間発展を 4 元ベクトル場 $A_{\mu}(x)$ で表現する方法が一意的ではなくて, $A_{\mu}(x)$ も $A_{\mu}(x)+\partial_{\mu}\chi(x)$ も同じことを記述しているのだと考えるわけである.

系の状態を記述する際のこのような任意性をとり除いて, 系の物理的な自由度を

議論しよう．そのためには，4 元ベクトル $A_\mu(x)$ に条件を 1 つ課して，系の仮想的な時間発展と $A_\mu(x)$ が 1 対 1 に対応するようにしてやればよい．そのような条件を課すことをゲージ固定とよんでいるが，よく用いられるものとして，

$$\text{Coulomb ゲージ} \qquad \nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{14.55}$$

$$\text{Lorentz ゲージ} \qquad \partial^\mu A_\mu=\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A_0+\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{14.56}$$

などがある．ここで，$\boldsymbol{A}(x)$ はベクトル・ポテンシャルであり，($\boldsymbol{A}(x)$ の i 成分)$=-A_i(x)$ で定義する．

例題 2　4 元ベクトル場 A_μ の 2 つの配位 $A_\mu'(x)$，$A_\mu''(x)$ がゲージ変換でつながっているとき，すなわち時空の無限遠方でゼロになるようなある $\chi(x)$ が存在して，$A_\mu'(x)=A_\mu''(x)+\partial_\mu\chi(x)$ となるとき，$A_\mu'(x)$ と $A_\mu''(x)$ はゲージ同値であるといおう．任意の $A_\mu(x)$ に対してそれとゲージ同値であり，$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ をみたすようなものが一意的に存在することを示せ．これは，Coulomb ゲージでは，たしかに仮想的な時間発展が一意的に 4 元ベクトル場 $A_\mu(x)$ で表現されていることを示している．

解　ゲージ変換に対して，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は，

$$\boldsymbol{A}\mapsto\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\chi$$

のように変換するから，$\nabla\cdot\boldsymbol{A}'=0$ であるためには，

$$\Delta\chi=-\nabla\cdot\boldsymbol{A} \tag{a}$$

であればよい．$\boldsymbol{A}$ が空間の無限遠方でゼロになるとすると，ⓐをみたすような，無限遠方でゼロになるような χ は一意的に存在する．■

Coulomb ゲージ(14.55)のもとで，作用(14.49)がどのような形になるか調べてみよう．まず，(14.49)を A_μ の時間成分 A_0 および空間成分 $\boldsymbol{A}$ を使って具体的に書くと，ラグランジアンは，

$$L=\int d^3x\left[\frac{1}{8\pi}\left\{\left(\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}+\nabla A_0\right)^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right\}-\rho A_0+\frac{1}{c}\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}\right] \tag{14.57}$$

となる．右辺の中括弧内の第 1 項の寄与は，Coulomb ゲージの条件(14.55)を使うと，

$$\begin{aligned}&\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\left(\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}+\nabla A_0\right)^2\\&=\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2+2\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}\cdot\nabla A_0+(\nabla A_0)^2\right\}\\&=\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2-2\frac{1}{c}(\nabla\cdot\dot{\boldsymbol{A}})A_0+(\nabla A_0)^2\right\}\end{aligned}$$

$$=\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2+(\nabla A_0)^2\right\} \tag{14.58}$$

となるから，ラグランジアン(14.57)は，Coulomb ゲージでは，

$$L=\int d^3x\left[\frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right\}+\frac{1}{c}\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}+\frac{1}{8\pi}(\nabla A_0)^2-\rho A_0\right] \tag{14.59}$$

と書ける．ここで，A_0 は時間微分を含んでいないことに注意しよう．それゆえ，A_0 に対する運動方程式

$$\frac{\delta S}{\delta A_0(x)}=0 \tag{14.60}$$

は，

$$-\frac{1}{4\pi}\Delta A_0-\rho=0 \tag{14.61}$$

となり，時間微分を含まない．(14.61)を A_0 について解くと，

$$A_0(\boldsymbol{x},t)=\int d^3y\,\frac{\rho(\boldsymbol{y},t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} \tag{14.62}$$

となるが，これを(14.59)に代入すると，A_0 を消去した最終的なラグランジアン

$$L'=\int d^3x\left[\frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right\}+\frac{1}{c}\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}\right]$$
$$-\frac{1}{2}\int d^3x d^3y\,\frac{\rho(\boldsymbol{x},t)\rho(\boldsymbol{y},t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} \tag{14.63}$$

が得られる．ここで，$\boldsymbol{A}$ は Coulomb ゲージの条件(14.55)をみたすとしている[1]．(14.63)の右辺の最後の項は，Coulomb 力によるエネルギーとみなせることに注意しよう．

Coulomb ゲージのハミルトニアン

ラグランジアン(14.63)を正準形式に書きなおそう．まず，正準運動量 $\boldsymbol{\pi}$ を，

$$\boldsymbol{\pi}=\frac{\delta L'}{\delta\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})}=\frac{1}{4\pi c^2}\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) \tag{14.64}$$

で定義すると，ハミルトニアンは，

$$H=\int d^3x\boldsymbol{\pi}\cdot\dot{\boldsymbol{A}}-L'$$
$$=\int d^3x\left[\frac{1}{8\pi}\left\{(4\pi c)^2\boldsymbol{\pi}^2+(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right\}-\frac{1}{c}\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}\right]$$

1) 条件(14.55)は $\boldsymbol{A}$ を Fourier 変換して，

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

と書いたとき，$\boldsymbol{k}\cdot\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})=0$，すなわち，$\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ はよこ波であることを示している．

$$+\frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y \frac{\rho(\boldsymbol{x}, t)\rho(\boldsymbol{y}, t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} \tag{14.65}$$

となる．ここで，(14.64)からわかるように $\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ と同様に，よこ波の条件

$$\nabla\cdot\boldsymbol{\pi}=0 \tag{14.66}$$

をみたしていることに注意しよう．そうすると，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ と $\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x})$ の間の古典的な Poisson 括弧は，

$$\begin{aligned}\{A^i(\boldsymbol{x}), \pi^j(\boldsymbol{y})\} &= \left(\delta^{ij}+\frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial}{\partial y^j}\frac{1}{\Delta}\right)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\ &= \delta^{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})-\frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial}{\partial y^j}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\end{aligned} \tag{14.67}$$

とすべきであることがわかるだろう．ここで，右辺が単なる $\delta^{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$ でないのは，$\dfrac{\partial}{\partial x^i}$ や $\dfrac{\partial}{\partial y^j}$ をかけたときにゼロとならなければならないからである．(14.67)は，つぎの例題のようにしても示すことができる．

例題 3　簡単のため，ラグランジアン(14.63)のうち，$\dot{\boldsymbol{A}}$ を含む部分だけを考える．すなわち，

$$L=\int d^3x \frac{1}{8\pi c^2}\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})^2 \tag{①}$$

とする．ここで，$\boldsymbol{A}$ は $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ をみたすものとする．発散がゼロであるようなベクトル場の正規直交基底を $\{\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x})\,;\, a=1,\ 2,\ \cdots\}$ とし，$\boldsymbol{A}$ を $\{\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x})\}$ で展開しよう．

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})=\sum_a q_a\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x}) \tag{②}$$

(1) L を q_a で表し，q_a の正準共役量を p_a としたとき，

$$\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x})=\sum_a p_a\,\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x}) \tag{③}$$

で $\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x})$ を定義すると，ハミルトニアンは，$H=\int d^3x \dfrac{1}{8\pi}(4\pi c)^2\boldsymbol{\pi}^2$　④

となり，Poisson 括弧は，

$$\{A^i(\boldsymbol{x}), \pi^j(\boldsymbol{y})\}=\sum_a \varphi_a^i(\boldsymbol{x})\,\varphi_a^j(\boldsymbol{y}) \tag{⑤}$$

となることを示せ．

(2) ⑤は，(14.67)と一致していることを示せ．

解　(1) ②より，$\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})=\sum_a \dot{q}_a\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x})$ であるが，これを①に代入すると，$\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x})$ が正規直交であることより，

$$L=\sum_a\frac{1}{8\pi c^2}\,(\dot{q}_a)^2$$

となる．よって，

$$p_a=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}=\frac{1}{4\pi c^2}\dot{q}_a \tag{ⓐ}$$

$$H=\sum_a p_a\dot{q}_a-L=\sum_a\frac{1}{8\pi}(4\pi c)^2p_a{}^2 \tag{ⓑ}$$

を得る．ⓑはたしかに④と一致している．⑤は②，③より，

$$\begin{aligned}\{A^i(\boldsymbol{x}),\pi^j(\boldsymbol{y})\}&=\sum_{a,b}\varphi_a{}^i(\boldsymbol{x})\varphi_b{}^j(\boldsymbol{y})\{q_a,p_b\}\\&=\sum_a\varphi_a{}^i(\boldsymbol{x})\varphi_a{}^j(\boldsymbol{y})\end{aligned}$$

と変形すると明らかである．

(2) $\{\boldsymbol{\varphi}_a(\boldsymbol{x})\}$ は，発散がゼロであるようなベクトル場の正規直交基底であるから，⑤の右辺の積分核

$$K^{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\sum_a\varphi_a{}^i(\boldsymbol{x})\varphi_a{}^j(\boldsymbol{y})$$

は，発散がゼロであるようなベクトル場への射影子になっている．すなわち，

$$\sum_j\int d^3zK^{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})K^{jl}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})=K^{il}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$$

であり，また任意のベクトル場 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$ に対して，

$$\sum_j\int d^3yK^{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})v^j(\boldsymbol{y})$$

は，発散がゼロのベクトル場である．(14.67)の右辺がこのような条件をみたしていることは容易に確かめられるが，このような射影子は一意的であるから，

$$K^{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\delta^{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})-\frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial}{\partial y^i}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}$$

が示される．　∎

ここまでの議論では，電荷密度および電流密度の具体的な形を使わなかったが，それらが N 個の非相対論的な粒子によって作られるとして，全系のハミルトニアンを求めてみよう．すなわち，出発点のラグランジアンとして(14.57)のかわりに，

$$\begin{aligned}L=&\int d^3x\frac{1}{8\pi}\left\{\left(\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}+\nabla A_0\right)^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right\}\\&+\sum_{i=1}^N\left\{\frac{m_i}{2}\dot{\boldsymbol{x}}_i{}^2-q_iA_0(\boldsymbol{x}_i)+\frac{1}{c}q_i\dot{\boldsymbol{x}}_i\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_i)\right\}-V(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\end{aligned} \tag{14.68}$$

をとるわけである．ここで，q_i は i 番目の粒子の電荷を表し，$V(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)$ は電磁場以外の力を表すポテンシャルとする．右辺の第2項で，A_0，$\boldsymbol{A}$ を含む部分を，

$$\sum_{i=1}^N\left\{-q_iA_0(\boldsymbol{x}_i)+\frac{1}{c}q_i\dot{\boldsymbol{x}}_i\cdot A(\boldsymbol{x}_i)\right\}$$

$$=\int d^3x\left\{-\left(\sum_{i=1}^{N}q_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\right)A_0(\boldsymbol{x})+\frac{1}{c}\left(\sum_{i=1}^{N}q_i\dot{\boldsymbol{x}}_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\right)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right\} \tag{14.69}$$

と書きかえると，

$$\rho(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}q_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i) \tag{14.70a}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}q_i\dot{\boldsymbol{x}}_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i) \tag{14.70b}$$

とおくことによって(14.57)に帰着することがわかる．Coulomb ゲージで，(14.57)を(14.63)に書きかえる手続きは，いまの場合もまったく同様に適用できて，A_0 を消去したラグランジアン

$$\begin{aligned}L'=&\int d^3x\frac{1}{8\pi}\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\}\\&+\sum_{i=1}^{N}\left\{\frac{m_i}{2}\dot{\boldsymbol{x}}_i^2+\frac{1}{c}q_i\dot{\boldsymbol{x}}_i\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_i)\right\}-\sum_{i<j}\frac{q_iq_j}{|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|}\\&-V(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\end{aligned} \tag{14.71}$$

が得られる．ここで，右辺の最後から2番目の項は，(14.63)の右辺の

$$-\frac{1}{2}\int d^3xd^3y\frac{\rho(\boldsymbol{x},t)\rho(\boldsymbol{y},t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}$$

に対応するものであり，A_0 を消去する際に得られる Coulomb 力によるポテンシャルを表しているが，$i=j$ の場合は，発散する定数となるのでおとした．

$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}_i$ $(i=1,2,\cdots,N)$ の正準共役量を，

$$\boldsymbol{\pi}=\frac{\delta L'}{\delta\dot{\boldsymbol{A}}}=\frac{1}{4\pi c^2}\dot{\boldsymbol{A}} \tag{14.72a}$$

$$\boldsymbol{p}_i=\frac{\partial L'}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}_i}=m_i\dot{\boldsymbol{x}}_i+\frac{1}{c}q_i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_i) \tag{14.72b}$$

で導入すると，ハミルトニアンは，最終的に，

$$\begin{aligned}H=&\int d^3x\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2\boldsymbol{\pi}^2+(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\}\\&+\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m_i}\left(\boldsymbol{p}_i-\frac{1}{c}q_i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_i)\right)^2+\sum_{i<j}\frac{q_iq_j}{|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|}+V(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\end{aligned} \tag{14.73}$$

と表される．ここで，$\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{\pi}$ は，よこ波の条件

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=\nabla\cdot\boldsymbol{\pi}=0 \tag{14.74}$$

をみたしており，(14.73)のハミルトニアンが表している場の物理的な自由度は，よこ波だけであることに注意しよう．

［問題2］ 物質がない場合の Coulomb ゲージのハミルトニアンから導かれる正準方程式を考え，電磁場の物理的な自由度は光の速さで伝幡するよこ波だけ

であることを確認せよ.

[解]　(14.65)で $\rho=0$, $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{0}$ とおくと,

$$H=\int d^3x\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2\boldsymbol{\pi}^2+(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\}$$

となる. Poisson 括弧(14.67)に注意して正準方程式を書くと,

$$\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})=\{\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}), H\}=4\pi c^2\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x})$$

$$\dot{\boldsymbol{\pi}}(\boldsymbol{x})=\{\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x}), H\}=-\frac{1}{4\pi}\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}))=\frac{1}{4\pi}\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$

となる. これから,

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\Delta\right)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$$

が得られるが, $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ であるから, これは光速 c で伝幡するよこ波を表している. ▮

14.3　自由な電磁場の量子化

電磁場を量子化するためには, 正準量子化の手続きに従って, Poisson 括弧(14.67)を交換子におきかえてやればよい. すなわち, Coulomb ゲージでは, 正準交換関係として, $[\hat{A}^i(\boldsymbol{x}),\ \hat{A}^j(\boldsymbol{y})]=[\hat{\pi}^i(\boldsymbol{x}),\ \pi^j(\boldsymbol{y})]=0$ のほかに

$$[\hat{A}^i(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}^j(\boldsymbol{y})]=i\hbar\left(\delta^{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})-\frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial}{\partial y^j}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right) \tag{14.75}$$

とすればよい. 電磁場の運動量 $\hat{\boldsymbol{P}}$ はスカラー場の場合(14.20)と同様に,

$$[\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{A}^i(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{A}^i(\boldsymbol{x}) \tag{14.76a}$$

$$[\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\pi}^i(\boldsymbol{x})]=i\hbar\nabla\hat{\pi}^i(\boldsymbol{x}) \tag{14.76b}$$

をみたすものとして定義されるが, 具体的には, (14.21)と同様に,

$$\hat{\boldsymbol{P}}=-\int(\nabla\hat{A}^i(\boldsymbol{x}))\hat{\pi}^i(\boldsymbol{x})\,d^3x \tag{14.77}$$

とすればよい.

まず物質がない自由な場合の電磁場を考えよう. ハミルトニアンは, (14.65)で $\rho=0$, $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{0}$ とすればよいから,

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2\hat{\boldsymbol{\pi}}^2+(\nabla\times\hat{\boldsymbol{A}})^2\}\\&=\int d^3x\,\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2(\hat{\pi}^i)^2+(\nabla\hat{A}^i)^2\}\end{aligned} \tag{14.78}$$

で与えられる. ここで, 第1行から第2行へ移るためには部分積分を行い, $\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{A}}=0$ であることを使った. これをスカラー場のハミルトニアン(14.22)で $m^2=0$ の場合

と比べてみると，場 $\hat{\pi}^i$, $\hat{A}^i$ に i という添字がついている以外はまったく同じ構造であることがわかる．すなわち，形式的に，

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \mapsto \sqrt{4\pi}\, c\hat{\pi}^i(\boldsymbol{x})$$
$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \mapsto \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{1}{c}\hat{A}^i(\boldsymbol{x}) \tag{14.79}$$

のようなおきかえをすると，(14.22)は(14.78)になる．このように考えると，(14.43)を(14.79)に従って読みかえると，ハミルトニアンが対角化できると考えるのが自然であろう．もう少し具体的にいうと，$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})$，$\hat{\boldsymbol{\pi}}(\boldsymbol{x})$ を，

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) = \sqrt{4\pi}\, c\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)} + \text{h.c.} \tag{14.80a}$$

$$\hat{\boldsymbol{\pi}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}\, c}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(-i)\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)} + \text{h.c.} \tag{14.80b}$$

の形に展開する．ここで，$\omega_{\boldsymbol{k}} = c\sqrt{\boldsymbol{k}^2} = c|\boldsymbol{k}|$ とし，偏極ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ $(\lambda=1,\ 2)$ はよこ波の基底であり，

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) = 0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}{}^*(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{(\nu)}(\boldsymbol{k}) = \delta_{\lambda\nu} \tag{14.81}$$

をみたすものとする．また，(14.80)の右辺の記号 h.c. は，その前のもののエルミート共役を表す．つぎの例題のようにして容易に確かめられるように，$\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ の間に交換関係

$$[\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}, \hat{c}_{\boldsymbol{k}'}^{(\nu)\dagger}] = \delta^{\lambda\nu}(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$$
$$[\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}, \hat{c}_{\boldsymbol{k}'}^{(\nu)}] = [\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}, \hat{c}_{\boldsymbol{k}'}^{(\nu)\dagger}] = 0 \tag{14.82}$$

が成り立っていると仮定すると，$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})$，$\hat{\boldsymbol{\pi}}(\boldsymbol{y})$ は交換関係(14.75)をみたし，ハミルトニアンおよび運動量は，

$$\hat{H} = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)} \tag{14.83a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}} = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}\hbar\boldsymbol{k}\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)} \tag{14.83b}$$

と書ける．

例題　(14.80)～(14.82)から(14.75)を導け．

解　(14.80)および(14.82)から少し計算すると，

$$[\hat{A}^i(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}^j(\boldsymbol{y})] = \frac{1}{2}i\hbar\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_{(\lambda)}^i(\boldsymbol{k})\varepsilon_{(\lambda)}^j{}^*(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})} - \text{h.c.}$$

が得られる．ところで，行列 $P^{ij} = \sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_{(\lambda)}^i(\boldsymbol{k})\varepsilon_{(\lambda)}^j{}^*(\boldsymbol{k})$ はよこ波への射影子であるから，$\delta^{ij} - \dfrac{k^ik^j}{\boldsymbol{k}^2}$ に等しい．

よって,

$$[\hat{A}^i(\boldsymbol{x}),\ \hat{\pi}^j(\boldsymbol{y})]=\frac{1}{2}\,i\hbar\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\delta^{ij}-\frac{k^ik^j}{\boldsymbol{k}^2}\right)e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}-\text{h.c.}$$
$$=i\hbar\left(\delta^{ij}+\frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial}{\partial y^j}\frac{1}{\Delta}\right)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$$

となり,たしかに(14.75)と一致している. ∎

スカラー場の場合と同様の議論を繰り返すと,(14.82)および(14.83)からわかるように,自由な電磁場の状態空間は,

$$\hat{c}_{\boldsymbol{k}_1}^{(\lambda_1)\dagger}\cdots\hat{c}_{\boldsymbol{k}_N}^{(\lambda_N)\dagger}|0\rangle=|\boldsymbol{k}_1,\lambda_1\,;\cdots;\boldsymbol{k}_N,\lambda_N\rangle \tag{14.84}$$

の形のものではられていることがわかる.また,これらの状態のエネルギーおよび運動量は,

$$\hat{H}|\boldsymbol{k}_1,\lambda_1\,;\cdots;\boldsymbol{k}_N,\lambda_N\rangle=\left(\sum_{i=1}^{N}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}_i}\right)|\boldsymbol{k}_1,\lambda_1\,;\cdots;\boldsymbol{k}_N,\lambda_N\rangle \tag{14.85a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}|\boldsymbol{k}_1,\lambda_1\,;\cdots;\boldsymbol{k}_N,\lambda_N\rangle=\left(\sum_{i=1}^{N}\hbar\boldsymbol{k}_i\right)|\boldsymbol{k}_1,\lambda_1\,;\cdots;\boldsymbol{k}_N,\lambda_N\rangle \tag{14.85b}$$

で与えられる.とくに,$N=1$ の場合は,状態

$$|\boldsymbol{k}\,;\lambda\rangle=\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}|0\rangle \tag{14.86}$$

のもつエネルギー ε および運動量 $\boldsymbol{p}$ は,

$$\varepsilon=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}=\hbar|\boldsymbol{k}|,\quad \boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k} \tag{14.87}$$

で与えられるから,$\varepsilon^2-c^2\boldsymbol{p}^2=0$ となり,質量がゼロの粒子を表している.これは,光子が1個ある状態と解釈できるが,$|\boldsymbol{k},\lambda\rangle=\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}|0\rangle$において λ は2通りの値をとりうることに注意しよう.これは,空間座標とは独立な自由度があることを意味しており,スピンとの類似を感じさせる.しかしながら,いまの場合は,粒子の質量はゼロであるから,粒子の静止系なるものは存在しないので,λ はスピンと完全には同じものではない.

生成演算子どうしは可換であるから,(14.84)のような状態は明らかに粒子の状態$(\boldsymbol{k}_1,\ \lambda_1)$, …, $(\boldsymbol{k}_N,\ \lambda_N)$を入れかえても不変である.このことは,スカラー場の場合と同様に光子がボソンであることを意味している.以上でみたように,自由な電磁場の状態空間は,(14.84)ではられるようなボソンの多体系の空間とみなせるが,このような空間のことを光子の Fock 空間とよんでいる.

14.4 物質と電磁場の相互作用

原子や原子核のように荷電粒子を含む系が,光子を吸収したり放出したりする過程を考えよう.荷電粒子を含む系は非相対論的にあつかえるとすると,電磁場との

相互作用も考慮したハミルトニアンは，(14.73)で与えられる．(14.73)を量子化したハミルトニアンを，

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V} \tag{14.88}$$

$$\hat{H}_0=\int d^3x\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2\hat{\boldsymbol{\pi}}^2+(\nabla\times\hat{\boldsymbol{A}})^2\}$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i{}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}\frac{q_iq_j}{|\hat{\boldsymbol{x}}_i-\hat{\boldsymbol{x}}_j|}+V(\hat{\boldsymbol{x}}_i,\cdots,\hat{\boldsymbol{x}}_N) \tag{14.89a}$$

$$\hat{V}=\sum_{i=1}^{N}\frac{-q_i}{2m_ic}(\hat{\boldsymbol{p}}_i\cdot\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}_i)+\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}_i)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_i)$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\frac{q_i{}^2}{2m_ic^2}(\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}_i))^2 \tag{14.89b}$$

のように，非摂動部分 $\hat{H}_0$ と摂動部分 $\hat{V}$ に分けよう．ここで，電磁場の演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})$，$\hat{\boldsymbol{\pi}}(\boldsymbol{x})$ は，(14.80)および(14.82)で与えられているものであり，$\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}_i)$ は，$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})$ の表式(14.80a)の $\boldsymbol{x}$ に演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}_i$ を代入したものである．

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}_i)=\sqrt{4\pi}\,c\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left\{\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}_i)\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}_i)\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\right\} \tag{14.90}$$

このように，ハミルトニアンを $\hat{H}_0$ と $\hat{V}$ に分解して，$\hat{V}$ を摂動とみなすことが妥当であるかどうかは具体例に応じてチェックしなければならない．しかしながら，以下でみるように基本的に摂動の効果は，微細構造定数 $\alpha=\dfrac{e^2}{\hbar c}\simeq\dfrac{1}{137}$ に比例しており，比例係数が1に比べてそれほど大きくなければ，摂動展開はよい近似になっている．

以下では摂動の最低次のみを議論することにするが，(14.89b)の右辺第2項は q_i^2 に比例しているから，第1項の寄与からくる2次摂動と同じ程度の量であることに注意しよう．それゆえ，摂動の最低次に関する議論では，摂動ハミルトニアンとして(14.89b)の第1項だけで十分であるが，それを，

$$\hat{V}=-\int d^3x\frac{1}{c}\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})\cdot\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) \tag{14.91a}$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}\frac{q_i}{2m_i}\{\hat{\boldsymbol{p}}_i\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)+\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)\hat{\boldsymbol{p}}_i\} \tag{14.91b}$$

の形に書こう．実際，(14.91b)を(14.91a)に代入して $\boldsymbol{x}$ に関する積分を遂行すると，(14.89b)の右辺の第1項が得られるのは明らかであろう．$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})$ は物質がつくる電流密度の演算子と解釈すべきものであるが，これは，$\hat{\boldsymbol{p}}_i$ を $m_i\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i$ でおきかえてみると

(14.91b)は，

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}q_i\frac{1}{2}\{\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)+\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i\} \tag{14.92}$$

となることからも納得できるだろう．ここで，電荷密度の演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{x})$ を，

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}q_i\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i) \tag{14.93}$$

で定義すると，電荷の保存則

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(\boldsymbol{x})=-\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x}) \tag{14.94}$$

が成り立っていることがつぎの例題のようにして示される．ここで，左辺の時間微分は，ハミルトニアンとして $\hat{H}_0$(14.89a)をとったときの時間発展，すなわち，相互作用表示における時間微分の意味とする．

例題 1　(1) 時間に依存する演算子 $\hat{O}(t)$ があり，各 t において $\hat{O}(t)$ とその時間微分 $\dot{\hat{O}}(t)$ の交換子は c 数であるとする．このとき，任意の関数 f に対して，

$$\frac{d}{dt}f(\hat{O}(t))=\frac{1}{2}\{\dot{\hat{O}}(t)f'(\hat{O}(t))+f'(\hat{O}(t))\dot{\hat{O}}(t)\}$$

となることを示せ．

(2) 電荷の保存則(14.94)を示せ．

解　(1) 示すべき式の両辺は f について1次だから，f が単項式 $f(x)=x^n$ の場合に示せればよい．この場合は，

$$\frac{d}{dt}f(\hat{O}(t))=\frac{d}{dt}(\hat{O}(t))^n=\sum_{k=0}^{n-1}(\hat{O}(t))^k\dot{\hat{O}}(t)(\hat{O}(t))^{n-1-k}$$

となるが，右辺の n 個の項を逆に並べたものとの平均の形に書くと，

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}f(\hat{O}(t))\\&=\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\{(\hat{O}(t))^k\dot{\hat{O}}(t)(\hat{O}(t))^{n-1-k}+(\hat{O}(t))^{n-1-k}\dot{\hat{O}}(t)(\hat{O}(t))^k\}\end{aligned} \tag{ⓐ}$$

となる．ところが，一般に，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換子が c 数のときは，$[\hat{A}^k,\hat{B}]=k[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^{k-1}$ だから，

$$\begin{aligned}&\hat{A}^k\hat{B}\hat{A}^l+\hat{A}^l\hat{B}\hat{A}^k\\&=(\hat{B}\hat{A}^{k+l}+[\hat{A}^k,\hat{B}]\hat{A}^l)+(\hat{A}^{k+l}\hat{B}+\hat{A}^l[\hat{B},\hat{A}^k])\\&=\hat{B}\hat{A}^{k+l}+\hat{A}^{k+l}\hat{B}\end{aligned}$$

となる．よって，ⓐの右辺の Σ 記号内の 各項は $\dot{\hat{O}}(t)\hat{O}(t)^{n-1}+\hat{O}(t)^{n-1}\dot{\hat{O}}(t)$ に等しくなり，

$$\frac{d}{dt}f(\hat{O}(t))=\frac{n}{2}\{\dot{\hat{O}}(t)\hat{O}(t)^{n-1}+\hat{O}(t)^{n-1}\dot{\hat{O}}(t)\}$$
$$=\frac{1}{2}\{\dot{\hat{O}}(t)f'(\hat{O}(t))+f'(\hat{O}(t))\dot{\hat{O}}(t)\}$$

が示された．

(2) 相互作用表示では，

$$\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{\boldsymbol{x}}_i]=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i}{m}$$

であるから，明らかに $\hat{\boldsymbol{x}}_i$ と $\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i$ の交換子はc数である．よって，(1)の結果から

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(\boldsymbol{x})=\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{N}q_i\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)$$
$$=\sum_{i=1}^{N}q_i\frac{1}{2}\left\{\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i\cdot\left(-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)\right)+\left(-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)\right)\cdot\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i\right\}$$
$$=-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\sum_{i=1}^{N}\frac{q_i}{2m_i}\{\hat{\boldsymbol{p}}_i\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}_i)+\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\hat{\boldsymbol{p}}_i\}$$
$$=-\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})$$

が示される．　▮

(14.89a)からわかるように，摂動のゼロ次では，粒子系と電磁場は完全に独立であるから，全系の状態は，

$$|\varphi_n\rangle|\xi_m\rangle \tag{14.95}$$

のように表される．ここで，$|\varphi_n\rangle$ は $\hat{H}_0$ のうちで粒子に関する部分

$$(\hat{H}_0)_{\text{粒子}}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i{}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}\frac{q_iq_j}{|\hat{\boldsymbol{x}}_i-\hat{\boldsymbol{x}}_j|}+V(\hat{\boldsymbol{x}}_1,\cdots,\hat{\boldsymbol{x}}_N) \tag{14.96a}$$

の固有関数であり，$|\xi_m\rangle$ は前節で議論したように $\hat{H}_0$ のうちで電磁場に関する部分

$$(\hat{H}_0)_{\text{電磁場}}=\int d^3x\frac{1}{8\pi}\{(4\pi c)^2\hat{\boldsymbol{\pi}}^2+(\nabla\times\hat{\boldsymbol{A}})^2\} \tag{14.96b}$$

の固有関数である．摂動の一般論によると，始状態 $|i\rangle$ にあるものが終状態 $|f\rangle$ に単位時間あたりに遷移する確率は，摂動の1次では，黄金則

$$w_{i\to f}=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2 \tag{14.97}$$

で与えられる．(14.91a)からわかるように，いまの場合，$\hat{V}$ は光子の生成・消滅演算子について1次式になっているから，この行列要素がゼロでないのは $|f\rangle$ に含まれる光子の数が $|i\rangle$ に含まれる光子の数より1だけ多いか少ないときだけである．すなわち，1次摂動は，粒子系が光子を1つだけ吸収あるいは放出する過程を表している．

始状態 $|i\rangle$ および終状態 $|f\rangle$ を(14.95)のように粒子系の状態と電磁場の状態に

分けて，

$$|i\rangle=|i\,;\,\text{粒子}\rangle|i\,;\,\text{電磁場}\rangle$$
$$|f\rangle=|f\,;\,\text{粒子}\rangle|f\,;\,\text{電磁場}\rangle \tag{14.98}$$

のように書こう．そうすると，$\hat{V}$ の行列要素は，

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle=-\int d^3x\frac{1}{c}\langle f\,;\,\text{粒子}|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})|i\,;\,\text{粒子}\rangle\cdot \cdot\langle f\,;\,\text{電磁場}|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|i\,;\,\text{電磁場}\rangle \tag{14.99}$$

のようになるが，ここに現れる行列要素 $\langle f\,;\,\text{粒子}|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})|i\,;\,\text{粒子}\rangle$ は遷移電流とよばれている．

［問題 3］ Coulomb ゲージにおける電磁場は，(14.80a) より，

$$\hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{x})=\sqrt{4\pi}\,c\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\text{h.c} \tag{①}$$

と交換関係 (14.82) により与えられている．ここでは，偏極ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{k})$ は (14.81) をみたすような 3 次元ベクトルであったが，これに形式的なゲージ変換を加えたものを $\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ としよう．すなわち，λ と $\boldsymbol{k}$ の任意関数 $\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ を使い，

$$\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})=\begin{cases}|\boldsymbol{k}|\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) & (\mu=0\text{ のとき})\\ (-\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{k})-\boldsymbol{k}\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\text{ の } i \text{ 成分} & (\mu=i\text{ のとき})\end{cases} \tag{②}$$

と定義する．次に 4 元ベクトル場の演算子 $\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x})$ を，

$$\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x})=\sqrt{4\pi}\,c\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})\hat{c}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\text{h.c.} \tag{③}$$

で導入し，また 4 元電流密度 $\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})$ を，

$$\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})=\begin{cases}c\hat{\rho}(\boldsymbol{x}) & (\mu=0\text{ のとき})\\ \hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})\text{ の } i \text{ 成分} & (\mu=i\text{ のとき})\end{cases} \tag{④}$$

とする．

(1) 摂動の 1 次では，相互作用ハミルトニアン $\hat{V}$ (14.91a) は，$\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ のとり方によらずに

$$\hat{V}'=\int d^3x\frac{1}{c}\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x}) \tag{⑤}$$

と等価であることを示せ．

(2) ②で定義される $\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ は $\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ のとり方にはよらずに，

$$k^\mu\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})=0,\quad \eta^{\mu\nu}\varepsilon_{(\lambda)\mu}^{*}(\boldsymbol{k})\varepsilon_{(\rho)\nu}(\boldsymbol{k})=-\delta_{\lambda\rho} \tag{⑥}$$

が成り立つことを示せ．ただし，$\boldsymbol{\varepsilon}_{(\lambda)}^{\text{Coulomb}}$ は (14.81) をみたしているものとする．

ここで，k^μ は，成分が $(|\boldsymbol{k}|, \boldsymbol{k})$ であるような 4 元ベクトルである．

(3) 逆に，⑥をみたすような $\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ $(\lambda=1, 2)$ があれば，それらは $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ にゲージ変換を加えたものであること，すなわち，(14.81) をみたすような適当な $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ と適当な λ と $\boldsymbol{k}$ の関数 $\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ によって②のように書けることを示せ．

［解］ (1) 相互作用表示における $\hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}$ および $\hat{A}_\mu$ の時間発展を陽に書くと，

$$\hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{4\pi}\, c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}} \exp\{-i(|\boldsymbol{k}|x^0 - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\} \sum_{\lambda=1}^{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) \hat{c}^{(\lambda)}_{\boldsymbol{k}} + \text{h.c.}$$

$$\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{4\pi}\, c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}} \exp\{-i(|\boldsymbol{k}|x^0 - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\} \sum_{\lambda=1}^{2} \varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k}) \hat{c}^{(\lambda)}_{\boldsymbol{k}} + \text{h.c.}$$

であるから，②より

$$\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} i\,\partial_0 \hat{\chi}(\boldsymbol{x}, t) & (\mu=0 \text{ のとき}) \\ (-\hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{x}, t) + i\nabla\hat{\chi}(\boldsymbol{x}, t)) \text{ の } i \text{ 成分} & (\mu=i \text{ のとき}) \end{cases} \qquad ⓐ$$

と書けることがわかる．ここで，$\hat{\chi}(\boldsymbol{x}, t)$ は，

$$\hat{\chi}(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{4\pi}\, c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}} \exp\{-i(|\boldsymbol{k}|x^0 - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\} \sum_{\lambda=1}^{2} \chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) \hat{c}^{(\lambda)}_{\boldsymbol{k}} + \text{h.c.}$$

で与えられる．ⓐ は，$\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x}, t)$ が $\hat{A}^{\text{Coulomb}}_\mu(\boldsymbol{x}, t) = (0, -\hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}(\boldsymbol{x}, t))$ にゲージ変換を施したものにほかならないことを示している．⑤で与えられた $\hat{V}'$ による 1 次摂動での遷移を考えるためには，相互作用表示で，

$$T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int dt \hat{V}'(t)\right] = 1 - \frac{i}{\hbar}\int dt \hat{V}'(t) + \cdots$$

を計算すればよいが，

$$\begin{aligned} \int dt \hat{V}'(t) &= \int dt \int d^3x \frac{1}{c} \hat{j}^\mu(x) \hat{A}_\mu(x) \\ &= \int dt \int d^3x \frac{1}{c} \hat{j}^\mu(x) \{\hat{A}^{\text{Coulomb}}_\mu(x) + i\partial_\mu \chi(x)\} \\ &= \int dt \int d^3x \frac{1}{c} \hat{j}^\mu(x) \hat{A}^{\text{Coulomb}}_\mu(x) \\ &= -\int dt \int d^3x \frac{1}{c} \hat{\boldsymbol{j}}(x) \cdot \hat{\boldsymbol{A}}^{\text{Coulomb}}(x) \\ &= \int dt \hat{V}(t) \end{aligned} \qquad ⓑ$$

となる．ここで，2 行目から 3 行目へ移るために部分積分を行い，電荷の保存則 $\partial_\mu j^\mu(x)=0$ を使った．ⓑ は，1 次摂動では，$\hat{V}$ と $\hat{V}'$ が等価であることを示している．

(2) $\varepsilon^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ を成分が $(0,\ -\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))$ であるような 4 元ベクトルとすると，②はまとめて，

$$\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})=\varepsilon^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})+k_\mu\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) \qquad ⓒ$$

と書ける．$\varepsilon^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ の $\mu=0$ の成分はゼロであることに注意すると，

$$k^\mu\varepsilon^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})=-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=0$$

$$\eta^{\mu\nu}\varepsilon^{*\text{Coulomb}}_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})\varepsilon^{\text{Coulomb}}_{(\rho)\nu}(\boldsymbol{k})=-\boldsymbol{\varepsilon}^{*\text{Coulomb}}_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{Coulomb}}_{(\rho)}(\boldsymbol{k})=-\delta_{\lambda\rho} \qquad ⓓ$$

となる．ⓒ，ⓓ および $k^\mu k_\mu=0$ より，⑥はすぐに示せる．

(3) ⑥をみたすような $\boldsymbol{k}$ に依存する 2 組の 4 元ベクトル $\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ $(\lambda=1,2)$ があったとする．$\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\dfrac{1}{|\boldsymbol{k}|}\varepsilon_{(\lambda)0}(\boldsymbol{k})$ とし，

$$\varepsilon'_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})=\varepsilon_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})-k_\mu\chi_{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$$

で $\varepsilon'_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ を定義すると，明らかに $\mu=0$ の成分はゼロである．(2)で行ったことを逆にたどると，$\varepsilon'_{(\lambda)\mu}(\boldsymbol{k})$ の空間成分の符号を変えたものは，Coulomb ゲージの偏極ベクトルの性質(14.81)をみたしていることがすぐにわかる．けっきょく，光子の波動関数としては Coulomb ゲージにこだわらずに，

$$\sqrt{4\pi}c\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k})\exp(-i|\boldsymbol{k}|x^0+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}),\quad k^\mu\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k})=0$$

としておけばよいことがわかった．また，偏極ベクトル $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{k})$ に k_μ に比例するようなもの $k_\mu\chi(\boldsymbol{k})$ をつけ加えても，ゲージ変換をしているだけで物理的な状態は同じである．　▮

14.5　光の吸収・放出に関する Einstein の関係式

輻射場のなかにおかれた原子が単位時間に光を吸収したり放出したりする確率についての Einstein の関係式を導こう．簡単のため，適当な境界条件をもつ箱のなかの電磁場を考え，場の演算子 $\hat{A}_\mu(x)$ をモード展開したものを，

$$\hat{A}_\mu(x)=\sum_n\{A^{(n)}_\mu(x)\hat{c}_n+A^{(n)}_\mu(x)^*\hat{c}_n{}^\dagger\} \qquad (14.100)$$

としよう．原子の電流密度の演算子を $\hat{j}^\mu(x)$ とすると，光子の吸収・放出を表す相互作用ハミルトニアンは(14.91 a)あるいは前節の［問題3］より，

$$\hat{V}=\frac{1}{c}\int d^3x\hat{j}^\mu(x)\hat{A}_\mu(x) \qquad (14.101)$$

で与えられる．電磁場の n 番目のモードに対応する光子を放出することによって原子の状態が $|i$；原子$\rangle$ から $|f$；原子$\rangle$ へ遷移する過程および，その逆の過程を考えよう．

まず光子を放出する場合を議論する．この場合，始状態で，原子は状態 $|i$；原子$\rangle$ にあり，電磁場は $|i$；電磁場$\rangle$ という状態にあるとすると，終状態では原子は状態 $|f$；原子$\rangle$ にあり，電磁場は，$|f$；電磁場$\rangle=\alpha\hat{c}_n{}^\dagger|i$；電磁場$\rangle$ という状態にあるはずである．ここで，α は規格化因子である．単位時間にこのような遷移が起こる確率は，(14.97)～(14.99)より，

$$
\begin{aligned}
w_{\text{放出}}&=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\left|\frac{1}{c}\int d^3x\langle f;\text{原子}|\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})|i;\text{原子}\rangle\cdot\right.\\
&\qquad\qquad\left.\cdot\langle f;\text{電磁場}|\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x})|i;\text{電磁場}\rangle\right|^2\\
&=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\left|\frac{1}{c}\int d^3x\langle f;\text{原子}|\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})|i;\text{原子}\rangle A_\mu^{(n)}(\boldsymbol{x})^*\cdot\right.\\
&\qquad\qquad\left.\cdot\langle f;\text{電磁場}|\hat{c}_n{}^\dagger|i;\text{電磁場}\rangle\right|^2
\end{aligned}
\tag{14.102}
$$

で与えられる．ここで，電磁場の始状態 $|i$；電磁場$\rangle$ では，いま注目している n 番目のモードの光子が N_n 個あったとしよう．すなわち，

$$
\hat{c}_n{}^\dagger\hat{c}_n|i;\text{電磁場}\rangle=N_n|i;\text{電磁場}\rangle \tag{14.103}
$$

とする．電磁場の終状態 $|f$；電磁場$\rangle$ は，$|i$；電磁場$\rangle$ に n 番目のモードの生成演算子 $\hat{c}_n{}^\dagger$ を作用させて規格化したものであるから，調和振動子の一般論より，

$$
\langle f;\text{電磁場}|\hat{c}_n{}^\dagger|i;\text{電磁場}\rangle=\sqrt{N_n+1} \tag{14.104}
$$

であることがわかる．ここで，調和振動子の数演算子 $\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値 N' の固有状態 $|N'\rangle$ による生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ の行列要素

$$
\langle N'+1|\hat{a}^\dagger|N'\rangle=\sqrt{N'+1} \tag{14.105}
$$

を使った。(14.104)を(14.102)に代入すると，

$$
w_{\text{放出}}=K(N_n+1)
$$

$$
K=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\left|\frac{1}{c}\int d^3x\langle f;\text{原子}|\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})|i;\text{原子}\rangle A_\mu^{(n)}(\boldsymbol{x})^*\right|^2 \tag{14.106}
$$

となり，N_n+1 に比例することがわかる．すなわち，原子が光子を放出する確率は，放出される光子のモードにはじめにいくつ光子があったかに依存するが，その依存性が N_n+1 に比例するようなものであることがわかった．とくに，はじめにモード n に光子がなかった場合は，原子が自発的に光子を放出するとみなして自発放出とよび，これに対して N_n に比例する部分は，N_n 個の光子によって誘発された放出とみなして誘導放出とよぼう．すなわち，(14.106)を自発放出と誘導放出の2つの和

$$w_{\text{放出}}=w_{\text{自発}}+w_{\text{誘導}}$$

$$w_{\text{自発}}=K,\quad w_{\text{誘導}}=KN_n \tag{14.107}$$

とみなすのである.

この結果を，これと同じ始状態の電磁場 $|i$；電磁場$\rangle$ のなかにおかれた状態 $|f$；原子$\rangle$ の原子がモード n の光子を吸収して状態 $|i$；原子$\rangle$ になる遷移確率と比べてみよう．この場合は，電磁場の終状態は，始状態に比べてモード n の光子が 1 つ減っているから，$|f'$；電磁場$\rangle=\alpha'\hat{c}_n|i$；電磁場$\rangle$ と書けているはずである．ここで α' は規格化因子である. 単位時間に，このような遷移が起こる確率は，(14.102) と同様に，

$$\begin{aligned}w_{\text{吸収}}&=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\left|\frac{1}{c}\int d^3x\langle i;\text{原子}|\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})|f;\text{原子}\rangle\cdot\right.\\&\qquad\left.\cdot\langle f';\text{電磁場}|\hat{A}_\mu(\boldsymbol{x})|i;\text{電磁場}\rangle\right|^2\\&=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\left|\frac{1}{c}\int d^3x\langle i;\text{原子}|\hat{j}^\mu(\boldsymbol{x})|f;\text{原子}\rangle A_\mu^{(n)}(\boldsymbol{x})\cdot\right.\\&\qquad\left.\cdot\langle f';\text{電磁場}|\hat{c}_n|i;\text{電磁場}\rangle\right|^2\end{aligned} \tag{14.108}$$

となる．今度は (14.105) のかわりに，

$$\langle N'-1|\hat{a}|N'\rangle=\sqrt{N'} \tag{14.109}$$

を使うと，

$$w_{\text{吸収}}=KN_n \tag{14.110}$$

と書けることがわかる. ここで比例係数 K は (14.106) に現れたものと同じである. (14.107) と (14.110) を比べると，モード n の光子を単位時間に放出する確率と吸収する確率の間の関係式

$$w_{\text{吸収}}=w_{\text{誘導}}=N_n\cdot w_{\text{自発}} \tag{14.111}$$

が得られる. ここに現れた光子の数 N_n は, つぎの例題のようにして現実的な量と結びついている.

例題　輻射場の単位体積あたりのエネルギーのうち, かたより $\boldsymbol{\varepsilon}$ をもち波数が $\boldsymbol{k}$ の付近にあるような光子によってになわれているものが,

$$dE_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}=T_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}\frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad ①$$

で与えられているとする．このとき，かたより $\boldsymbol{\varepsilon}$ をもち波数が $\boldsymbol{k}$ であるようなモードにある光子の数 $N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}$ は，いくらか.

解　かたより $\boldsymbol{\varepsilon}$ を決めたときは，単位体積あたりのモードの個数が $\dfrac{d^3k}{(2\pi)^3}$ で与えられることを思い出そう．各モードに $N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}$ 個の光子があるとするとエネルギーは，

$$dE_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

となる．これを①と比べると，

$$N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}=\frac{T_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}}{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}$$

を得る．　▮

［問題 4］　温度 T の黒体輻射と熱平衡にあるたくさんの原子を考える．簡単のため，1 つの種類の原子だけを考え，個々の原子はエネルギー E_1，E_2 $(E_1<E_2)$ の 2 つの準位だけをもつとする．熱平衡では個々の原子がエネルギー E_i $(i=1, 2)$ の状態にある相対確率は，$\exp\left(-\dfrac{E_i}{kT}\right)$ で与えられることに注意してつぎの問いに答えよ．

(1) 状態が平衡に達していれば，単位時間内に黒体輻射から光子を吸収して状態 1 から状態 2 に変わる原子の数と，光子を放出して状態 2 から 1 に変わる原子の数は等しいはずである．このことから，原子による光子の放出確率と吸収確率の比が，

$$\frac{w_{放出}}{w_{吸収}}=\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \qquad ①$$

であることを示せ．ここで $\hbar\omega=E_2-E_1$ であり，ω は放出される光子の振動数である．

(2) 温度 T の黒体輻射において，かたよりが $\boldsymbol{\varepsilon}$ であり，波数が $\boldsymbol{k}$ であるようなモードにある光子の個数は，

$$N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}=\frac{1}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{kT}\right)-1} \qquad ②$$

であることを示せ．

(3) 吸収確率 $w_{吸収}$ は，$|\boldsymbol{k}|=\dfrac{\omega}{c}$ であるような $\boldsymbol{k}$ に対する $N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}$ に比例しており，

$$w_{吸収}=KN_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}} \qquad ③$$

と書けるとしたとき，①と②より Einstein の関係

$$w_{放出}=K(N_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\varepsilon}}+1) \qquad ④$$

が導かれることを示せ．

［解］ (1) 熱平衡において，状態 i にある原子数を $N_i\,(i=1,2)$ とすると，

$$\frac{N_1}{N_2}=\frac{\exp\left(-\frac{E_1}{kT}\right)}{\exp\left(-\frac{E_2}{kT}\right)}=\exp\left(\frac{E_2-E_1}{kT}\right)$$

である．単位時間に状態 1 から状態 2 に変わる原子の数は，$N_1 w_{\text{吸収}}$ であり，状態 2 から状態 1 に変わる原子の数は $N_2 w_{\text{放出}}$ である．これらを等しいとおくと，

$$N_1 w_{\text{吸収}}=N_2 w_{\text{放出}}$$

となり，これから①

$$\frac{w_{\text{放出}}}{w_{\text{吸収}}}=\frac{N_1}{N_2}=\exp\left(\frac{E_2-E_1}{kT}\right)=\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$$

が得られる．

(2) ②は Planck の式を導く途中で出てきたものであり，

$$N_{\boldsymbol{k},\varepsilon}=\frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{kT}n\right)}{\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{kT}n\right)}$$

より従う．

(3) ①は，

$$\frac{w_{\text{放出}}}{w_{\text{吸収}}}=\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)=\frac{1}{N_{\boldsymbol{k},\varepsilon}}+1$$

と書けるが，これに③を代入すると，ただちに④

$$w_{\text{放出}}=w_{\text{吸収}}\left(\frac{1}{N_{\boldsymbol{k},\varepsilon}}+1\right)=K(N_{\boldsymbol{k},\varepsilon}+1)$$

が得られる． ∎

14.6 双極子輻射

励起状態の原子が光子を放出してエネルギーが低い準位におちる単位時間あたりの確率を求めよう．原子の始状態および終状態を $|i$；原子〉, $|f$；原子〉とし，放出される光子は，かたより $\boldsymbol{\varepsilon}$，波数 $\boldsymbol{k}$ をもっているとする．(14.80a) を思い出すと，(14.99) はこの場合，

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = -\int d^3x \frac{1}{c}\langle f\,;\,原子|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})|i\,;\,原子\rangle\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^*\sqrt{4\pi}c\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$= -\sqrt{4\pi}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k}) \tag{14.112}$$

と書けることがわかる．ここで，$\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})$ は遷移電流の波数 $\boldsymbol{k}$ の Fourier 成分であり，

$$\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k}) = \int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\langle f\,;\,原子|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})|i\,;\,原子\rangle \tag{14.113}$$

で定義されている．(14.112)を黄金則に代入すると，原子の始状態および終状態のエネルギーを E_i，E_f として，単位時間あたりの遷移確率は，

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_i - E_f - \hbar\omega_{\boldsymbol{k}})|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2}\delta\left(\frac{E_i - E_f}{\hbar} - \omega\right)4\pi\frac{\hbar}{2\omega}|\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})|^2\frac{\omega^2}{(2\pi)^3c^3}d\omega d\Omega \tag{14.114}$$

$$= \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3}|\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})|^2 d\Omega$$

と書ける．ここで，$\omega = \dfrac{E_i - E_f}{\hbar}$ であり，$d\Omega$ は放出される光子の立体角である．

電流の演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})$ の形(14.91b)を思い出すと，その Fourier 変換は，

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{k}) = \int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x})$$

$$= \sum_{i=1}^{N}\frac{q_i}{2m_i}(\hat{\boldsymbol{p}}_i\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}_i) + \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}_i)\hat{\boldsymbol{p}}_i) \tag{14.115}$$

であることがわかる．ここで，放出される光の波長は原子の大きさ a に比べて十分長い，すなわち，$ka \ll 1$ として(14.115)の $\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}_i)$ を 1 におきかえてしまおう．そうすると，

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{k}) \simeq \sum_{i=1}^{N}\frac{q_i}{m_i}\hat{\boldsymbol{p}}_i = \sum_{i=1}^{N}q_i\dot{\hat{\boldsymbol{x}}}_i = \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{d}} \tag{14.116}$$

と書ける．ここで，$\hat{\boldsymbol{d}}$ は電気双極子モーメントの演算子であり，

$$\hat{\boldsymbol{d}} = \sum_{i=1}^{N}q_i\hat{\boldsymbol{x}}_i \tag{14.117}$$

で定義される．(14.116)に現れた時間微分は相互作用表示での時間微分のことであり，

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{k}) = \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{d}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{\boldsymbol{d}}] \tag{14.118}$$

を意味する．よって，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k}) &= \langle f\,;\,\text{原子}\,|\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{k})\,|\,i\,;\,\text{原子}\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)\langle f\,;\,\text{原子}\,|\,\hat{\boldsymbol{d}}\,|\,i\,;\,\text{原子}\rangle \\ &= -i\omega \boldsymbol{d}_{fi} \end{aligned} \tag{14.119}$$

が得られる．ここで，$\boldsymbol{d}_{fi}$ は，

$$\boldsymbol{d}_{fi} = \langle f\,;\,\text{原子}\,|\,\hat{\boldsymbol{d}}\,|\,i\,;\,\text{原子}\rangle \tag{14.120}$$

で定義されているものとする．(14.119)を(14.114)に代入するとけっきょく，$ka \ll 1$ の場合の近似として，

$$dw = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}|\boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \boldsymbol{d}_{fi}|^2 d\Omega \tag{14.121}$$

が得られる．

ここで行った近似は，(14.116)のように電流を双極子モーメントの時間変化でおきかえたわけであり，古典論の双極子輻射に対応しているはずである．実際，(14.121) に $\hbar\omega$ をかけて輻射の強度を求めると，

$$dI = \frac{\omega^4}{2\pi c^3}|\boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \boldsymbol{d}_{fi}|^2 d\Omega \tag{14.122}$$

となるが，d_{fi}を古典論的な双極子モーメントの角振動数 ω の Fourier 成分 $\boldsymbol{d}_s$でおきかえれば，(14.122)は古典的な双極子輻射の強度を与える式になる．ここで，$\boldsymbol{d}_s$ は周期運動をする系の双極子モーメントの Fourier 成分である．

$$\boldsymbol{d}(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{-is\omega_0 t}\boldsymbol{d}_s \tag{14.123}$$

例題 双極子輻射による単位時間あたりの全遷移確率は，

$$w = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{fi}|^2 \tag{14.124}$$

で与えられることを示せ．

解 (14.121) をかたよりのベクトルについてたしあげ，$d\Omega$ について積分すればよい．(14.121) は，a，b を3次元ベクトルの足として[1]，

$$dw = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\varepsilon^{a*}\varepsilon^b d_{fi}^a d_{fi}^{b*} d\Omega$$

と書ける．$\boldsymbol{n} = \dfrac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}$ に垂直な2つのかたよりについてたすと，

$$\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_{(\lambda)}^{a*}\varepsilon_{(\lambda)}^{b} = \delta^{ab} - n^a n^b$$

であるから，

1) よびやすいので，テンソルの添字のことを足ともいう．

$$\sum_{\lambda=1}^{2} dw = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}(\delta^{ab} - n^a n^b) d_{fi}^a d_{fi}^{b*} d\Omega$$

となる．$d\Omega$についての積分は，

$$\delta^{ab}\int d\Omega = 4\pi\delta^{ab}$$

$$\int d\Omega n^a n^b = \int d\Omega \frac{1}{3}\delta^{ab}\left(\sum_{c=1}^{3} n^c n^c\right) = \frac{4\pi}{3}\delta^{ab}$$

より，

$$\int d\Omega(\delta^{ab} - n^a n^b) = \frac{8\pi}{3}\delta^{ab}$$

とすれば計算できる．けっきょく，単位時間あたりの全遷移確率 w は，

$$w = \int \sum_{\lambda=1}^{2} dw = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\frac{8\pi}{3}\delta^{ab} d_{fi}^a d_{fi}^{b*}$$

$$= \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{fi}|^2$$

となる．　▮

[問題 5]　水素原子の $2p$ 状態の寿命を求めよ．

[解]　水素原子の $1s$ および $2p$ の波動関数は，それぞれ，

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a_B^3}}\exp\left(-\frac{r}{a_B}\right)$$

$$\psi_{2p} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{a_B^3}}\frac{r}{a_B}\exp\left(-\frac{r}{2a_B}\right)\cos\theta$$

である．ここで $a_B = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ は Bohr 半径であり，$2p$ 状態の波動関数としては $\hat{L}_z$ の固有値がゼロのものを書いた．電気双極子モーメント $\boldsymbol{d}$ は，いまの場合，

$$\hat{\boldsymbol{d}} = e\hat{\boldsymbol{r}}$$

にほかならないから，上の波動関数から行列要素を計算すると，

$$\langle 1s|\hat{d}_x|2p\rangle = \langle 1s|\hat{d}_y|2p\rangle = 0$$

$$\langle 1s|\hat{d}_z|2p\rangle = \frac{2^{\frac{15}{2}}}{3^5}ea_B$$

を得る．これを (14.124) に代入し，$\hbar\omega = E_{2p} - E_{1s} = \dfrac{3}{8}\dfrac{e^2}{a_B}$ であることに注意すると，単位時間あたりに $2p$ が $1s$ におちる確率は，

$$w=\frac{4}{3\hbar c^3}\left(\frac{3}{8}\frac{e^2}{\hbar a_B}\right)^3\left(\frac{2^{\frac{15}{2}}}{3^5}ea_B\right)^2=\left(\frac{2}{3}\right)^8\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\frac{e^2}{\hbar a_B}$$
$$=\frac{2^{11}}{3^9}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\cdot\frac{E_{2p}-E_{1s}}{\hbar}$$
$$\simeq 4.0\times 10^{-8}\frac{E_{2p}-E_{1s}}{\hbar}$$

であることがわかる．ここで微細構造定数 $\frac{e^2}{\hbar c}\simeq\frac{1}{137}$ が1に比べて小さい量であることから，単位時間あたりの遷移確率は，エネルギー差 $E_{2p}-E_{1s}$ を $\hbar$ でわって振動数に換算したものより7～8桁も小さいことに注意しよう．これは，水素原子と電磁場の相互作用(14.89b)を摂動としてとりあつかうのが非常によい近似であったことを示している．寿命 τ は w の逆数であるから，

$$\tau=\frac{1}{w}=\left(\frac{3}{2}\right)^8\cdot\left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^3\cdot\frac{\hbar c}{c}\frac{1}{2\cdot\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_B}}$$
$$\simeq\left(\frac{3}{2}\right)^8\cdot(137)^3\cdot\frac{200\ \mathrm{MeV\cdot fm}}{3\times10^8\mathrm{m\cdot sec^{-1}}}\cdot\frac{1}{2\times13.6\ \mathrm{eV}}$$
$$=1.6\times10^{-9}\mathrm{sec}$$

である．　▮

第14章　章末問題

［1］　3次元空間内で，ベクトル $\boldsymbol{v}$ を原点を通り $\boldsymbol{\theta}$ に平行な軸のまわりに角度 $|\boldsymbol{\theta}|$ だけ回転する変換を $R(\boldsymbol{\theta})$ と書こう．

$$\boldsymbol{v}\mapsto R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{v}$$

ベクトル場 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ に変換 $R(\boldsymbol{\theta})$ を施したものとは，場所 $\boldsymbol{r}$ にあったベクトル $\boldsymbol{A}$ を，

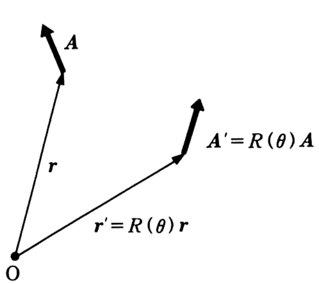


図　ベクトル場の回転

場所 $\boldsymbol{r}'=R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}$ へ回転してもっていったもの $\boldsymbol{A}'=R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{A}$ のこととする（図参照）．すなわち，変換後のベクトル場を $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})$ と書くと，

$$\boldsymbol{A}'(R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r})=R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$$

をみたしているとする．

(1) 無限小回転を表す微分演算子 $\boldsymbol{J}$ を，

$$\left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J}\right)\boldsymbol{A}\right)(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})=R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{A}(R(\boldsymbol{\theta})^{-1}\boldsymbol{r}) \quad ①$$

をみたすように定義すると，

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{S}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S} \quad ②$$

となることを示せ．ここで，$\boldsymbol{S}$ はベクトル場 $\boldsymbol{A}$ の 3 つの成分をたてベクトルとみなしたときに，それに作用する 3×3 行列であり，

$$S_x=i\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad S_y=i\hbar\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{pmatrix},$$

$$S_z=i\hbar\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

で与えられる．

(2) $\boldsymbol{J}$ は，$\boldsymbol{r}$ の大きさにはよらずに方向にだけ依存するから，単位球面 $\{\boldsymbol{r}\,;\,|\boldsymbol{r}|=1\}$ の上で定義された 3 成分ベクトル場に対して作用しているものとみなせる．このとき，$\boldsymbol{J}^2$ および J_z を対角化する正規直交基底として，

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{Y}^{(\text{たて})}_{j,m}(\boldsymbol{n})=\boldsymbol{n}Y_j^m(\boldsymbol{n}) && (j=0,1,2,\cdots)\\
&\boldsymbol{Y}^{(\text{電})}_{j,m}(\boldsymbol{n})=\frac{\nabla_n}{\sqrt{j(j+1)}}Y_j^m(\boldsymbol{n}) && (j=1,2,3,\cdots) \quad ③\\
&\boldsymbol{Y}^{(\text{磁})}_{j,m}(\boldsymbol{n})=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{Y}^{(\text{電})}_{j,m}(\boldsymbol{n}) && (j=1,2,3,\cdots)
\end{aligned}$$

がとれることを示せ．ここで，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値を $\hbar^2 j(j+1)$，J_z の固有値を $\hbar m$ とする．また，ここでは単位球面上の関数を単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の関数とみなし，∇_n は球面上でのグラディエントを表すとする．いいかえると，$\boldsymbol{r}$ の方向 $\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}$ だけに依存する関数 $f(\boldsymbol{r})=f(\boldsymbol{n})$ に対して，

$$\nabla_n f(\boldsymbol{n})=|\boldsymbol{r}|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{r})$$

である．$Y_l^m(\boldsymbol{n})$ は普通の球関数である．

$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{たて})}(\boldsymbol{n})$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}(\boldsymbol{n})$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{磁})}(\boldsymbol{n})$ をまとめて球ベクトルとよんでいる．

［解］ (1) $\boldsymbol{\theta}$ が無限小のとき，$R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{v}$ に注意して①の両辺の $\boldsymbol{\theta}$ について1次の部分を書くと，

$$\left(-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{A}\right)(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})-\left((\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{r})\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$$

となる．よって，

$$(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{A}=i\hbar\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{A}+\frac{\hbar}{i}\left(\boldsymbol{\theta}\cdot\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\right)\boldsymbol{A}$$

が得られるが，これを各成分について書いたものが②にほかならない．

(2) ベクトル場に対する回転の定義が，図のように座標と同時に場の値 $\boldsymbol{A}$ も回転するものであることを思い出すと，Y_j^m に $\boldsymbol{n}$，∇_n，$\boldsymbol{n}\times\nabla_n$ などを作用させてから回転したものは，Y_j^m を回転してから $\boldsymbol{n}$，∇_n，$\boldsymbol{n}\times\nabla_n$ を作用させたものに等しいことは幾何学的にも明らかであろう．よって，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{たて})}$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{磁})}$ の $\boldsymbol{J}^2$，J_z の固有値は，Y_j^m の $\boldsymbol{L}^2$，L_z の固有値に等しい．これらの3つの球ベクトルがたがいに直交していることは，簡単に示せる．実際，j，m の値が異なっているものはエルミート演算子 $\boldsymbol{J}^2$，J_z の異なる固有値に属するから，明らかにたがいに直交している．j，m の値が等しいものに関しては，③の定義より明らかに，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{たて})}$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}$，$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{磁})}$ の球面上の各点 $\boldsymbol{n}$ における値はたがいに直交するベクトルである．よってこれらの内積を表す積分 $\int d\Omega\,\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(a)}(\boldsymbol{n})^*\cdot\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(b)}(\boldsymbol{n})$ (a, $b=$ たて，電，磁，$a\neq b$) の被積分関数はゼロであるから，もちろん積分値もゼロである．

③で与えられた球ベクトルが1に規格化されていることも以下のようにして容易にチェックできる．

$$\int d\Omega\,\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{たて})}(\boldsymbol{n})^*\cdot\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{たて})}(\boldsymbol{n})=\int d\Omega\,Y_j^m(\boldsymbol{n})^*Y_j^m(\boldsymbol{n})=1 \qquad \text{ⓐ}$$

$$\int d\Omega\,\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}(\boldsymbol{n})^*\cdot\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}(\boldsymbol{n})=\frac{1}{j(j+1)}\int d\Omega(\nabla_n Y_j^m)^*\cdot(\nabla_n Y_j^m)$$

$$=\frac{1}{j(j+1)}\int d\Omega\,Y_j^{m*}(-\Delta_n)Y_j^m=\frac{1}{j(j+1)}\int d\Omega\,Y_j^{m*}\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{L}^2Y_j^m=1 \qquad \text{ⓑ}$$

$$\int d\Omega\,\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{磁})}(\boldsymbol{n})^*\cdot\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{磁})}(\boldsymbol{n})=\int d\Omega(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})})^*\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})})$$

$$=\int d\Omega\,\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})*}\cdot\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(\text{電})}=1 \qquad \text{ⓒ}$$

ここで, ⓑでは ∇_n に関して部分積分を行い, 球面上のラプラシアン $\Delta_n=\nabla_n\cdot\nabla_n$ は $-\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{L}^2$ に等しいことを使った. ⓒでは, $\boldsymbol{Y}^{(\text{電})}_{j,\,m}(\boldsymbol{n})$ の $\boldsymbol{n}$ における値は単位球の接線方向であることから, $\boldsymbol{Y}^{(\text{磁})}_{j,m}(\boldsymbol{n})=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{Y}^{(\text{電})}_{j,m}(\boldsymbol{n})$ と $\boldsymbol{Y}^{(\text{電})}_{j,m}(\boldsymbol{n})$ の同じ $\boldsymbol{n}$ における値は, 大きさが等しいことを使った.

最後に, ③が完全系をなしていることは, つぎのようにしてわかる. ②の $\boldsymbol{J}$ の定義をみればすぐわかるように, いま考えている空間は, 軌道角運動量と大きさ 1 のスピン角運動量を合成したものである. よって各軌道角運動量 l に対してとりうる j の値は,

$$
\begin{aligned}
l&=0 \quad \Rightarrow \quad j=1\\
l&=1 \quad \Rightarrow \quad j=2,\ 1,\ 0\\
l&=2 \quad \Rightarrow \quad j=3,\ 2,\ 1\\
l&=3 \quad \Rightarrow \quad j=4,\ 3,\ 2\\
&\ \ \vdots
\end{aligned}
$$

となるから, $j=0$ は 1 回だけであるが, $j=1,\ 2,\ \cdots$ は 3 回現れることになる. これは, ちょうど③と対応している.

[2] (1) Coulomb ゲージにおけるベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},\ t)$ がみたすべき方程式は

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \qquad ①$$

$$\Box\boldsymbol{A}=0 \qquad ②$$

で与えられる. ここで, $\Box$ はダランベルシアンであり, $\Box\boldsymbol{A}=\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\Delta\right)\boldsymbol{A}$ のことである. ①, ②の解の完全系として,

$$\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}(\boldsymbol{x},\ t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\ \exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\tilde{\boldsymbol{A}}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}(\boldsymbol{k})$$

$$\tilde{\boldsymbol{A}}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}(\boldsymbol{k})=\frac{4\pi^2\hbar^{\frac{1}{2}}c^{\frac{5}{2}}}{\omega^{\frac{3}{2}}}\delta\left(|\boldsymbol{k}|-\frac{\omega}{c}\right)\boldsymbol{Y}^{(a)}_{j,m}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\right) \qquad ③$$

がとれることを示せ. ここで, $\boldsymbol{Y}^{(a)}_{j,m}(\boldsymbol{n})$ は前問で定義した球ベクトルであり, a は電あるいは磁の 2 通りをとりうるとする. また, $\omega_{\boldsymbol{k}}=c|\boldsymbol{k}|$ である.

(2) Coulomb ゲージで量子化されたベクトル・ポテンシャルは, Heisenberg 表示で,

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x},\ t)=\int d\omega\sum_{a=\text{電},\,\text{磁}}\ \sum_{j=1}^{\infty}\sum_{m=-j}^{j}\hat{c}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}(\boldsymbol{x})+\text{h.c.} \qquad ④$$

と展開できることを示せ. ここで, $\hat{c}^{(a)}_{\omega\,;\,j,\,m}$ は交換関係

$$[\hat{c}^{(a)}_{\omega;j,m}, \hat{c}^{(a')}_{\omega';j',m'}]=0$$

$$[\hat{c}^{(a)}_{\omega;j,m}, \hat{c}^{(a')\dagger}_{\omega';j',m'}]=\delta(\omega-\omega')\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \qquad ⑤$$

をみたすものとする.

(3) $\hat{c}^{(a)}_{\omega;j,m}$ (a=電, 磁) は, ともに振動数 ω, 角運動量の大きさ j, 角運動量の z 成分 m の光子の消滅演算子であるが, 光子のパリティは a=電のときは $(-1)^j$ であるのに対し, a=磁のときは $(-1)^{j+1}$ であることを示せ.

$\hat{c}^{(電)}_{\omega;j,m}$ に対応する光子を E-j 光子, $\hat{c}^{(磁)}_{\omega;j,m}$ に対応する光子を M-j 光子とよんでいる.

[解] (1) $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ を $\boldsymbol{x}$ について Fourier 変換して,

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k},t) \qquad ⓐ$$

と書いて②に代入し, $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ の係数をみると,

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{k}^2\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k},t)=0$$

が得られる. これから,

$$\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k},t)=\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t)\tilde{\boldsymbol{A}}'(\boldsymbol{k})+\exp(i\omega_{\boldsymbol{k}}t)\tilde{\boldsymbol{A}}''(-\boldsymbol{k})$$

と書けることがわかる. これをⓐに代入すると,

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left\{\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\tilde{\boldsymbol{A}}'(\boldsymbol{k})+\exp(i\omega_{\boldsymbol{k}}t-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}''(\boldsymbol{k})\right\}$$

となるが, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ は実ベクトル値関数としているから,

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})+\text{c.c.} \qquad ⓑ$$

を得る. ここで記号 c.c は, 前のものの複素共役を意味する. ここまでの計算で, ②の一般解は, ⓑで $\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})$ を任意の複素ベクトル値関数としたものであることがわかった. ⓑを①に代入すればすぐにわかるように, ①をみたすためには,

$$\boldsymbol{k}\cdot\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})=0 \qquad ⓒ$$

が必要十分である.

ここで, $\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{k})$ を $|\boldsymbol{k}|$ および $\dfrac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}$ の関数とみなそう. $|\boldsymbol{k}|$ の関数の完全系としては,

$$\delta\left(|\boldsymbol{k}|-\frac{\omega}{c}\right) \qquad (\omega>0)$$

をとり, $\dfrac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}$ の関数の完全系としては, 前問の球ベクトル

$$\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(a)}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\right) \quad (a=\text{電, 磁}\,;\, j=1,2,\cdots\,;\, m=-j,\cdots,j)$$

がとれる．ここで，「a=たて」が現れないのは条件ⓒがあるからである．以上によって，①，②の解は，適当な複素係数 $c_{\omega;j,m}^{(a)}$ によって

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)=\int d\omega\sum_a\sum_j\sum_m c_{\omega;j,m}^{(a)}\boldsymbol{A}_{\omega;j,m}^{(a)}(\boldsymbol{x},t)+\text{c.c.}$$

の形に展開できることがわかった．

(2) Heisenberg 表示のベクトル・ポテンシャル $\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x},t)$ は Coulomb ゲージで，

$$\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{A}}=0$$
$$\Box\hat{\boldsymbol{A}}=0$$

をみたすから，(1)とまったく同様にして④が示される．③を④に代入して積分の順序を入れかえると，

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\exp(-i\omega_{\boldsymbol{k}}t+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\sqrt{4\pi}c\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{k})+\text{h.c.}$$

$$\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{k})=\sum_a\sum_j\sum_m \hat{c}_{\omega_{\boldsymbol{k}};j,m}^{(a)}\frac{2\sqrt{2}\pi^{\frac{3}{2}}c^{\frac{3}{2}}}{\omega_{\boldsymbol{k}}}\boldsymbol{Y}_{j,m}^{(a)}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\right)$$

となる．ここで，$\hat{c}_{\omega;j,m}^{(a)}$ が⑤の交換関係をみたすとすると，明らかに $\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{k})$ どうしは可換

$$[\hat{c}^r(\boldsymbol{k}),\hat{c}^s(\boldsymbol{k}')]=0$$

であり，$\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{k})$ と $\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{k}')^\dagger$ は，

$$\begin{aligned}&[\hat{c}^r(\boldsymbol{k}),\hat{c}^s(\boldsymbol{k}')^\dagger]\\&=\sum_a\sum_j\sum_m\frac{(2\pi)^3c^3}{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}\delta(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega_{\boldsymbol{k}'})\left(Y_{j,m}^{(a)}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|}\right)\right)^r\left(Y_{j,m}^{(a)}\left(\frac{\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}'|}\right)\right)^{*}_{s}\\&=(2\pi)^3\cdot\frac{c^3}{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}\delta(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega_{\boldsymbol{k}'})\delta^{(\text{球面})}_{\frac{\boldsymbol{k}}{|\boldsymbol{k}|},\frac{\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}'|}}\cdot\left(\delta^{rs}-\frac{k^rk^s}{\boldsymbol{k}^2}\right)\end{aligned} \qquad ⓓ$$

となることがわかる．ここで，$\delta^{(\text{球面})}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'}$ は球面上のデルタ関数であり，球ベクトルの完全性の条件

$$\sum_{a=\text{たて, 電, 磁}}\sum_j\sum_m(Y_{j,m}^{(a)}(\boldsymbol{n}))^r(Y_{j,m}^{(a)}(\boldsymbol{n}'))^{*}_{s}=\delta^{rs}\delta^{(\text{球面})}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'}$$

および，ふつうの球関数の完全性から従う式

$$\sum_j\sum_m(Y_{j,m}^{(\text{たて})}(\boldsymbol{n}))^r(Y_{j,m}^{(\text{たて})}(\boldsymbol{n}'))^{*}_{s}=n^rn^s\delta^{(\text{球面})}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'}$$

を辺々引いて得られる恒等式

$$\sum_{a=\text{電},\ \text{磁}} \sum_j \sum_m (Y^{(a)}_{j,m}(\boldsymbol{n}))^r (Y^{(a)}_{j,m}(\boldsymbol{n}'))^*_s = (\delta^{rs} - n^r n^s)\delta^{(\text{球面})}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'}$$

を使った．ⓓの右辺は，平面波の生成・消滅演算子の交換子

$$(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\left(\delta^{rs}-\frac{k^r k^s}{\boldsymbol{k}^2}\right)$$

に等しいから，⑤が正しい交換関係であることがわかる．

(3) 場に対する角運動量の演算子を，前問［1］の②で定義した微分演算子 $\boldsymbol{J}$ と区別して $\hat{\boldsymbol{J}}$ と書こう．そうすると，場に対するユニタリー変換 $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}\right)$ は，

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}\right)\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}\right)=\left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J}\right)\hat{\boldsymbol{A}}\right)(\boldsymbol{x})$$

となっているはずである．すなわち，

$$[\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}),\hat{\boldsymbol{J}}]=(\boldsymbol{J}\hat{\boldsymbol{A}})(\boldsymbol{x})$$

が成り立つ．1 光子状態 $|a\,;\,\omega,j,m\rangle$ を，

$$|a\,;\,\omega,j,m\rangle=\hat{c}^{(a)\dagger}_{\omega\,:\,j,m}|0\rangle$$

で定義すると，

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|a\,;\,\omega,j,m\rangle=\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,:\,j,m}(\boldsymbol{x})$$

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{J}}|a\,;\,\omega,j,m\rangle&=\langle 0|[\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}),\hat{\boldsymbol{J}}]|a\,;\,\omega,j,m\rangle\\&=\langle 0|(\boldsymbol{J}\hat{\boldsymbol{A}})(\boldsymbol{x})|a\,;\,\omega,j,m\rangle=(\boldsymbol{J}\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,:\,j,m})(\boldsymbol{x})\end{aligned} \qquad ⓔ$$

が得られる．ここで真空 $|0\rangle$ は，回転に対して不変であること，$\hat{\boldsymbol{J}}|0\rangle=0$，を使った．ⓔは，$\hat{\boldsymbol{J}}$ の $|a\,;\,\omega,j,m\rangle$ に対する作用が $\boldsymbol{J}$ の $\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega;j,m}(\boldsymbol{x})$ に対する作用と同じであることを示しているから，$|a\,;\,\omega,j,m\rangle$ は角運動量の大きさが j であり，z 成分が m であるような状態であることがわかった．

一方，パリティ変換 $\hat{P}$ を，

$$\begin{cases}\hat{P}^2=1\\ \hat{P}^{-1}\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})\hat{P}=-\hat{\boldsymbol{A}}(-\boldsymbol{x})\\ \hat{P}|0\rangle=|0\rangle\end{cases}$$

をみたすものとして定義すると，上と同様の議論により，$\hat{P}$ の $|a\,;\,\omega,j,m\rangle$ に対する作用は，$\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,:\,j,m}(\boldsymbol{x})$ を $-\boldsymbol{A}^{(a)}_{\omega\,:\,j,m}(-\boldsymbol{x})$ に変える作用と同じであることがわかる．球ベクトルの定義式（前問［1］の③）よりすぐわかるように，

$$-\boldsymbol{Y}^{(a)}_{j,m}(-\boldsymbol{n})=(-1)^{q_a}(-1)^j\boldsymbol{Y}^{(a)}_{j,m}(\boldsymbol{n})$$

$$q_a=\begin{cases}0\,(a=\text{たて，または，電のとき})\\1\,(a=\text{磁のとき})\end{cases}$$

だから，E-j 光子のパリティは $(-1)^j$ であるが，M-j 光子のパリティは $(-1)^{j+1}$ である．

[3]　(1)　一般に運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{P}}$ と角運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ から作られる演算子

$$\hat{h}=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}{\sqrt{\hat{\boldsymbol{P}}^2}\hbar}$$

をヘリシティとよぶ．$\hat{h}$ は，物理的には粒子の進行方向のまわりの角運動量である．$\hat{h}$ は $\hat{\boldsymbol{J}}$ とも $\hat{\boldsymbol{P}}$ とも可換であることを示せ．

(2) 1光子状態 $|\psi\rangle$ の波動関数とは，$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$ のこととする．運動量 $\boldsymbol{k}$，ヘリシティ h の1光子状態 $|\boldsymbol{k}, h\rangle$ の波動関数を求めよ．h のとりうる値はいくらか．

[解]　(1) $\hat{\boldsymbol{P}}$ も $\hat{\boldsymbol{J}}$ もベクトル演算子であるから，$\hat{h}$ はスカラー演算子である．よって，$\hat{h}$ は $\hat{\boldsymbol{J}}$ と可換である．

$\hat{\boldsymbol{P}}$ の3つの成分は，たがいに可換であり，$\hat{\boldsymbol{J}}$ とは交換関係

$$[\hat{P}^i, \hat{J}^j]=i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{P}^k$$

をみたすから，

$$[\hat{P}^i, \hat{\boldsymbol{P}}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}]=[\hat{P}^i, \hat{P}^j\hat{J}^j]=i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{P}^j\hat{P}^k=0$$

よって，$\hat{h}$ と $\hat{\boldsymbol{P}}$ は可換である．

(2) 前問［2］の解ⓔと同様にして，一般に，

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{J}}|\psi\rangle=\boldsymbol{J}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$$

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{P}}|\psi\rangle=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$$

が示せる．ここで，$\boldsymbol{J}$ は［1］の②で定義された微分作用素である．よって，

$$\langle 0|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}|\psi\rangle=\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{J}\right)\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$$

$$=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\left(\boldsymbol{x}\times\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{S}\right)\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{S}\right)\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\psi\rangle$$

が成り立つ．よって，運動量 $\boldsymbol{k}$，ヘリシティ h をもつ1光子状態の波動関数 $\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}, h\rangle$ は，

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}, h\rangle=\boldsymbol{k}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}, h\rangle$$

$$\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{S}}{|\boldsymbol{k}|\hbar}\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}, h\rangle = h\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}, h\rangle$$

をみたす．とくに，$\boldsymbol{k}$ が z 軸方向を向いているときは，

$$\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{S}}{|\boldsymbol{k}|\hbar} = \frac{S_z}{\hbar} = i\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

だから，この固有値は+1，−1 であり，対応する固有ベクトルはそれぞれ，

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$$

である．ここで固有値 0 をもつ固有ベクトル $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を考えなかったのは，これはたて波であり，Coulomb ゲージの条件 $\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{A}}=0$ から除外されるからである．よって，いまの場合の波動関数は，

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|(0, 0, k), 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz}$$

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})|(0, 0, k), -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz}$$

である．$\boldsymbol{k}$ の方向が一般のときも同様にすればよい．けっきょく，1 光子状態のとりうるヘリシティは±1 である．このことから，しばしば光子のスピンは 1 であるといわれるが，これは (14.87) のすぐあとで述べたように注意を要する．また $|\boldsymbol{k}, \pm 1\rangle$ は円偏光のようなものと理解できる．

第15章　Dirac 方程式

電子や核子などスピン $\frac{1}{2}$ の粒子はたくさんあるが，そのような粒子を相対論的効果も含めて記述するのが本章の目的である．スピン $\frac{1}{2}$ の粒子の非相対論的極限の波動方程式，すなわちスピノル場に対する Schrödinger 方程式は，明らかに Lorentz 変換に対しては共変でない．15.1 節ではスピノルの概念を拡張して Lorentz 共変なスピノルを導入し，15.2 節で Dirac 方程式を導く．15.3 節では外場のない自由な場合に Dirac 方程式を解く．その結果，正エネルギー解と負エネルギー解があることがわかるが，真空とは，負エネルギー状態が全部つまったものであるという Dirac の解釈を導入する．けっきょく，相対論では粒子の1体問題は意味を失うわけであるから，第二量子化しておいたほうが自然である．最後に，章末問題で Dirac 方程式のめざましい特徴の1つとして，粒子の広がりが Compton 波長に比べて十分小さいときは，g 因子が2に等しくなることを示す．

15.1　共変なスピノル場

Lorentz 変換に対して共変なスピノル場を導入する前に，3 次元のスピノルを少し復習しておこう．3 次元のスピノルの基本になるのは，Pauli 行列 σ^a $(a=1,2,3)$ であった．σ^a の基本的な性質は，反交換関係

$$\{\sigma^a, \sigma^b\}=2\delta^{ab} \tag{15.1}$$

である．通常は(15.1)をみたす σ^a $(a=1,2,3)$ として，とくに 2 行 2 列の Pauli 行列をとる．そうすると，σ^a の符号を適当に選ぶと，

$$\sigma^a\sigma^b=i\varepsilon^{abc}\sigma^c \tag{15.2}$$

が成り立つことがわかるが，一般には，(15.1)だけから(15.2)が従うわけではない．ここでは，(15.2)は使わずに，(15.1)だけを基本関係として話をすすめる．

(15.1)をみたす σ^a $(a=1,2,3)$ が与えられたとき，L^{ab} という行列を，

$$L^{ab}=\frac{1}{4}(\sigma^a\sigma^b-\sigma^b\sigma^a) \tag{15.3}$$

によって定義すると，明らかに，

$$L^{ab}=-L^{ba} \tag{15.4}$$

であり，L^{ab} どうしは交換関係

$$[L^{ab}, L^{cd}]=\delta^{bc}L^{ad}-\delta^{ac}L^{bd}+\delta^{bd}L^{ca}-\delta^{ad}L^{cb} \tag{15.5}$$

をみたす．

例題 1　(15.1)および(15.3)から，(15.5)を示せ．

解　(i) まず，公式 $[AB, C]=A\{B, C\}-\{A, C\}B$ を使って計算すると，

$$\begin{aligned}[L^{ab}, \sigma^c]&=\left[\frac{1}{4}(\sigma^a\sigma^b-\sigma^b\sigma^a), \sigma^c\right]\\&=\frac{1}{4}(\sigma^a\{\sigma^b, \sigma^c\}-\{\sigma^a, \sigma^c\}\sigma^b)-(a\leftrightarrow b)\\&=\frac{1}{2}\delta^{bc}\sigma^a-\frac{1}{2}\delta^{ac}\sigma^b-(a\leftrightarrow b)\\&=\delta^{bc}\sigma^a-\delta^{ac}\sigma^b\end{aligned} \tag{ⓐ}$$

が得られる．

(ii) ⓐおよび公式 $[A, BC]=[A, B]C+B[A, C]$ を使うと，

$$\begin{aligned}[L^{ab}, \sigma^c\sigma^d]&=[L^{ab}, \sigma^c]\sigma^d+\sigma^c[L^{ab}, \sigma^d]\\&=(\delta^{bc}\sigma^a-\delta^{ac}\sigma^b)\sigma^d+\sigma^c(\delta^{bd}\sigma^a-\delta^{ad}\sigma^b)\\&=\delta^{bc}\sigma^a\sigma^d-\delta^{ac}\sigma^b\sigma^d+\delta^{bd}\sigma^c\sigma^a-\delta^{ad}\sigma^c\sigma^b\end{aligned} \tag{ⓑ}$$

が得られる．すなわち，L^{ab} と $\sigma^c\sigma^d$ の交換子を求めるためには，$\sigma^c\sigma^d$ のそれぞれの

足（c および d）がⓐのように変換するものと考えればよい．よって，ⓑで $\sigma^c\sigma^d$ を形式的に L^{cd} によみかえれば，

$$[L^{ab}, L^{cd}]=\delta^{bc}L^{ad}-\delta^{ac}L^{bd}+\delta^{bd}L^{ca}-\delta^{ad}L^{cb}$$

が求まる．∎

ここで，L'^{ab}を a-b 面内での回転の生成子とすると，(15.5)はその交換関係そのものであることに注意しよう．これをみるために，L'^{ab} をベクトル v^i を a-b 面内で無限小回転する行列としよう．すなわち θ を無限小角として，

$$v^i \quad \underset{a\text{-}b\,\text{面内の}\,\theta\,\text{回転}}{\longmapsto} \quad v^i-\theta(L'^{ab})^i{}_j v^j \tag{15.6}$$

とする．a-b 面内の回転を考えればすぐにわかるように，行列 L'^{ab} の $i\,j$ 成分は，$i=a$，$j=b$ のとき 1，$i=b$，$j=a$ のとき -1 であり，他の成分はゼロである．すなわち，

$$(L'^{ab})^i{}_j = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ \\ \end{array}\!\!\begin{pmatrix} & \overset{a}{\vdots} & \overset{b}{\vdots} \\ \cdots & \cdots & 1 \\ \cdots & -1 & \cdots \\ & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \text{の}\; i\,j\; \text{成分}$$

$$=\delta^{ai}\delta^b{}_j-\delta^{bi}\delta^a{}_j \tag{15.7}$$

と書ける．ここで δ^{ai}，$\delta^b{}_j$ はどちらも通常の Kronecker のデルタである．そうすると，

$$\begin{aligned}
([L'^{ab}, L'^{cd}])^i{}_j&=(L'^{ab})^i{}_k(L'^{cd})^k{}_j-(L'^{cd})^i{}_k(L'^{ab})^k{}_j\\
&=(\delta^{ai}\delta^b{}_k-\delta^{bi}\delta^a{}_k)(\delta^{ck}\delta^d{}_j-\delta^{dk}\delta^c{}_j)-\begin{pmatrix} c\leftrightarrow a\\ d\leftrightarrow b\end{pmatrix}\\
&=\delta^{bc}\delta^{ai}\delta^d{}_j-\delta^{ac}\delta^{bi}\delta^d{}_j-\delta^{bd}\delta^{ai}\delta^c{}_j+\delta^{ad}\delta^{bi}\delta^c{}_j-\begin{pmatrix} c\leftrightarrow a\\ d\leftrightarrow b\end{pmatrix}\\
&=\delta^{bc}(\delta^{ai}\delta^d{}_j-\delta^{di}\delta^a{}_j)-\delta^{ac}(\delta^{bi}\delta^d{}_j-\delta^{di}\delta^b{}_j)\\
&\quad+\delta^{bd}(\delta^{ci}\delta^a{}_j-\delta^{ai}\delta^c{}_j)-\delta^{ad}(\delta^{ci}\delta^b{}_j-\delta^{bi}\delta^c{}_j)\\
&=\delta^{bc}(L'^{ad})^i{}_j-\delta^{ac}(L'^{bd})^i{}_j+\delta^{bd}(L'^{ca})^i{}_j-\delta^{ad}(L'^{cb})^i{}_j
\end{aligned} \tag{15.8}$$

と計算できるが，これは，L'^{ab} の交換関係と L^{ab} の交換関係(15.5)は同じであることを示している．いいかえると，(15.3)で定義される L^{ab} は，回転群の生成子の表現になっているわけである．

例題 2 σ^a (a=1, 2, 3) として(15.2)をみたす通常の2行2列のものをとった場合，(15.3)はふつうのスピン行列にほかならないことをチェックせよ．

解 L^{ab} は a-b 面内の回転であるから，通常は，L^{23}，L^{31}，L^{12} を $\frac{i}{\hbar}\hat{S}^1$，$\frac{i}{\hbar}\hat{S}^2$，

$\frac{i}{\hbar}\hat{S}^3$ と書いているわけである．

たとえば，

$$\hat{S}^1=\frac{\hbar}{i}L^{23}=\frac{\hbar}{i}\frac{1}{4}(\sigma^2\sigma^3-\sigma^3\sigma^2)$$

であるが，(15.2) より $\sigma^2\sigma^3=i\sigma^1$，$\sigma^3\sigma^2=-i\sigma^1$ とすると，

$$\hat{S}^1=\frac{\hbar}{2}\sigma^1$$

となる．他の成分も同様に計算すると，

$$\hat{S}^a=\frac{\hbar}{2}\sigma^a$$

というよく知られた形になる． ∎

以上の議論は多少まわりくどく感じるかもしれないが，このようにしておくと，高次元への拡張はほとんど自明である．実際，(15.1) と (15.3) から (15.5) を導く議論では σ^a の a がどの範囲を動くかはまったく使っていないし，a，b，… を 1 から D までを動く添字であるとすると，(15.5) は，D 次元空間内での回転の生成子のみたすべき交換関係にほかならない．それでは，Lorentz 変換の場合はどうであろうか．よく知られているように，Lorentz 変換は 4 次元空間のなかでの回転と似た構造をもっているから，上の議論を多少修正すれば，Lorentz 共変なスピノルが構成できると期待されるが，実際そうであることが以下のようにしてわかる．

まず，(15.7) に対応するものとして 4 元ベクトル v^μ に対する Lorentz 変換

$$v^\mu \quad \underset{\text{Lorentz 変換}}{\longmapsto} \quad v^\mu-\theta(L')^\mu{}_\nu v^\nu \tag{15.9}$$

の形を思い出しておこう[1]．ここで，θ は無限小量とする．Lorentz 変換とは v^μ の 4 元長さ $\eta_{\mu\nu}v^\mu v^\nu$ を不変に保つ線型変換のことであるから，行列 $(L')^\mu{}_\nu$ に対する条件として，

$$\begin{aligned}\eta_{\mu\nu}v^\mu v^\nu&=\eta_{\mu\nu}(v^\mu-\theta(L')^\mu{}_\alpha v^\alpha)(v^\nu-\theta(L')^\nu{}_\beta v^\beta)\\&=\eta_{\mu\nu}v^\mu v^\nu-\theta(\eta_{\mu\beta}(L')^\mu{}_\alpha+\eta_{\alpha\nu}(L')^\nu{}_\beta)v^\alpha v^\beta\end{aligned} \tag{15.10}$$

すなわち，

$$(L')_{\alpha\beta}+(L')_{\beta\alpha}=0 \tag{15.11}$$

を得る．ここで，$(L')_{\alpha\beta}$ とは，

$$(L')_{\alpha\beta}=\eta_{\alpha\mu}(L')^\mu{}_\beta \tag{15.12}$$

1) 以下，$a, b,$ …や $i, j,$ …などのローマ字は 3 次元空間に関する添字とし，$\alpha, \beta,$ …や $\mu, \nu,$ …などのギリシャ文字は 4 次元時空に関する添字とする．

のことである．(15.11)は$(L')_{\alpha\beta}$が反対称行列であることを主張しているだけだから，$(L')_{\alpha\beta}$は，μ，νでラベルされた以下の6つの行列$(L'^{\mu\nu})_{\alpha\beta}$の線型結合で書けることがわかる．

$$(L'^{\mu\nu})_{\alpha\beta}=\delta^{\mu}{}_{\alpha}\delta^{\nu}{}_{\beta}-\delta^{\mu}{}_{\beta}\delta^{\nu}{}_{\alpha} \tag{15.13}$$

これは明らかに，

$$(L'^{\mu\nu})_{\alpha\beta}=-(L'^{\nu\mu})_{\alpha\beta} \tag{15.14}$$

をみたしているから，独立なものは，$0\leqq\mu<\nu\leqq3$のものに限られ，全部で6つである．(15.12)に示されているように，いまわれわれが欲しいLorentz変換の行列$(L')^{\alpha}{}_{\beta}$は，$(L')_{\alpha\beta}$のαの足を上にあげたものである．けっきょく，(15.13)におけるαの足を上にあげることにより，6つの無限小Lorentz変換が得られる．

$$(L'^{\mu\nu})^{\alpha}{}_{\beta}=\eta^{\mu\alpha}\delta^{\nu}{}_{\beta}-\delta^{\mu}{}_{\beta}\eta^{\nu\alpha} \tag{15.15}$$

ここで，$\mu=0$，$\nu=i$ $(i=1,2,3)$のものはi方向へのブーストを表し[1]，$\mu=i$，$\nu=j$ $(i,j=1,2,3)$のものは，i-j面内での回転を表している．

つぎに，$L'^{\mu\nu}$の交換関係を求めよう．(15.15)が(15.7)と以た形をしていることに気づけば，(15.7)から(15.8)を得たのと同様の計算を繰り返すことにより，

$$[L'^{\mu\nu},L'^{\alpha\beta}]=\eta^{\nu\alpha}L'^{\mu\beta}-\eta^{\mu\alpha}L'^{\nu\beta}+\eta^{\nu\beta}L'^{\alpha\mu}-\eta^{\mu\beta}L'^{\alpha\nu} \tag{15.16}$$

が得られることは明らかであろう．すなわち，回転を考えた際に現れた$\delta^{a}{}_{b}$はそのまま$\delta^{\mu}{}_{\nu}$におきかえ，δ^{ab}は$\eta^{\mu\nu}$におきかえてやれば，形式的にはLorentz変換の場合も回転の場合も同じ形をしているといってよい．

このように考えると，(15.1)のかわりに4個の行列γ^{μ} $(\mu=0,\ 1,\ 2,\ 3)$を反交換関係

$$\{\gamma^{\mu},\gamma^{\nu}\}=2\eta^{\mu\nu} \tag{15.17}$$

をみたすものとして導入し，$L^{\mu\nu}$を(15.3)のかわりに，

$$L^{\mu\nu}=\frac{1}{4}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu}) \tag{15.18}$$

で定義するのが自然であることがわかる．当然，

$$L^{\mu\nu}=-L^{\nu\mu} \tag{15.19}$$

であるが，例題1と同様の計算を繰り返すと，まず，

$$[L^{\mu\nu},\gamma^{\alpha}]=\eta^{\nu\alpha}\gamma^{\mu}-\eta^{\mu\alpha}\gamma^{\nu} \tag{15.20}$$

が導かれ，つぎに，$L^{\mu\nu}$が$L'^{\mu\nu}$と同じ交換関係(15.16)をみたすことがわかる．

つぎに，反交換関係(15.17)をみたす行列γ^{μ} $(\mu=0,\ 1,\ 2,\ 3)$を具体的に求めてみ

1)　i方向へのブーストとは，i方向に一定の速さで動いている慣性系への座標変換のことである．

よう．まず，

$$\frac{\gamma_0+\gamma_1}{2}=a_+^1,\quad \frac{\gamma_0-\gamma_1}{2}=a_-^1$$

$$\frac{\gamma_2+i\gamma_3}{2}=a_+^2,\quad \frac{-\gamma_2+i\gamma_3}{2}=a_-^2 \tag{15.21}$$

により $a_\pm^1$, $a_\pm^2$ を定義すると，簡単な計算ののち，

$$\{a_+^i, a_-^j\}=\delta^{ij},$$
$$\{a_+^i, a_+^j\}=\{a_-^i, a_-^j\}=0 \tag{15.22}$$

となり，a_+^i, a_-^i を i 番目のフェルミオンの生成・消滅演算子とみなしたときの反交換関係と同じであることがわかる．よって，$|0\rangle$ を，

$$a_-^j|0\rangle=0 \qquad (j=1,2) \tag{15.23}$$

によって定義すると，γ^μ $(\mu=0,1,2,3)$，あるいは同じことであるが，$a_\pm^i$ $(i=1,2)$ の既約な表現空間は，

$$|0\rangle,\ a_+^1|0\rangle,\ a_+^2|0\rangle,\ a_+^1a_+^2|0\rangle \tag{15.24}$$

の 4 つではられることがわかる，以上の議論から，反交換関係(15.17)をみたす行列 γ^μ $(\mu=0,1,2,3)$ の既約な表現空間は 4 次元であり，基底のとりかえを除いて一意的であることがわかった．γ 行列の具体的な表示としてよく使われるものにつぎの標準表示がある．

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix},\qquad \gamma^i=\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix} \tag{15.25}$$

ここで，σ^i は 2 行 2 列の Pauli 行列であり，$\mathbf{1}$ は 2 行 2 列の単位行列を意味する．

例題 3　標準表示の γ 行列が反交換関係(15.17)をみたすことをチェックせよ．

解　$(\gamma^0)^2=1$，$(\gamma^i)^2=\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-(\sigma^i)^2 & 0\\ 0 & -(\sigma^i)^2\end{pmatrix}=-1$

$$\gamma^0\gamma^i+\gamma^i\gamma^0=\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ \sigma^i & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & -\sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}=0$$

$\gamma^i\gamma^j+\gamma^j\gamma^i=0$　$(i\neq j)$も同様にチェックできる。 ▮

以上によって γ 行列の表現空間が構成できたから，(15.18)によりその空間の上に作用する Lorentz 変換の表現が得られたことになる．γ 行列の働く空間は複素 4 次元空間であるから，当然(15.18)によって誘導される Lorentz 変換の表現も 4 次元表現であるが，それがどのようなものであるか物理的な内容を調べておこう．そ

のために，(15.18)で定義されるLorentz変換の生成子のうちで，回転に対応するものを考えよう．例題2で議論したように，スピンの演算子 $\hat{S}^i$ は，

$$\hat{S}^1 = i\hbar L^{23},\quad \hat{S}^2 = i\hbar L^{31},\quad \hat{S}^3 = i\hbar L^{12} \tag{15.26}$$

であるが[1]，標準表示(15.21)では，

$$L^{ij} = \frac{1}{4}(\gamma^i\gamma^j - \gamma^j\gamma^i) = -\frac{1}{4}\begin{pmatrix} [\sigma^i, \sigma^j] & \\ & [\sigma^i, \sigma^j] \end{pmatrix}$$
$$= -\frac{i}{2}\varepsilon^{ijk}\begin{pmatrix} \sigma^k & \\ & \sigma^k \end{pmatrix} \tag{15.27}$$

だから，

$$\hat{S}^i = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma^i & \\ & \sigma^i \end{pmatrix} \qquad (i=1,2,3) \tag{15.28}$$

であることがわかる．すなわち，いまLorentz変換の表現として現われた複素4次元空間は，3次元回転に対しては，2成分スピノル2組の直和であったわけである．以下でみるように，Dirac方程式ではこの2組のスピノルは粒子と反粒子に対応していると解釈できる．以下，γ 行列が働く複素4次元空間，あるいは，それを成分表示した複素4成分量をDiracスピノルとよぶことにする．

15.2　Dirac 方 程 式

Diracスピノルに対する共変な波動方程式を導こう．まず外場との相互作用がまったくないような自由粒子の場合からはじめる．γ 行列が働く空間を陽に成分表示して ψ^i $(i=1,2,3,4)$ と書こう．これに対応して γ 行列も成分で $(\gamma^\mu)^i{}_j$ と書くことにする．すなわち，$\gamma^\mu\psi$ の第 i 成分は，

$$(\gamma^\mu\psi)^i = (\gamma^\mu)^i{}_j\psi^j \tag{15.29}$$

である。

前節の議論からわかったように，4次元ベクトル v^μ を，

$$v^\mu \longmapsto v^\mu - \theta_{\alpha\beta}(L'^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu v^\nu \tag{15.30}$$

のように変えるようなLorentz変換に対して，Diracスピノル ψ^i は，

$$\psi^i \longmapsto \psi^i - \theta_{\alpha\beta}(L^{\alpha\beta})^i{}_j\psi^j \tag{15.31}$$

のように変換する．ここで，$L'^{\alpha\beta}$，$L^{\alpha\beta}$ はそれぞれ，(15.15)および(15.18)で定義されている．ところで，よく知られているように，相対論の議論をすすめるためには，

---

1)　(15.15)と(15.7)を比べればわかるように，われわれの記法では，$L^{\mu\nu}$ の空間部分(μ, $\nu=1, 2, 3$) は3次元回転を議論したときの L^{ij} と全体の符号が違っていることに注意.

(15.30)のように変換するベクトルのほかに,

$$u_\mu \mapsto u_\mu + \theta_{\alpha\beta} u_\nu (L'^{\alpha\beta})^\nu{}_\mu \tag{15.32}$$

のように変換するベクトルも考えると便利であった. 通常(15.30)と(15.32)を区別するために, v^μ のような変換を受ける量を反変ベクトル, u_μ のような変換を受ける量を共変ベクトルとよんでいる. これと同様に, (15.31)のように変換するスピノルのほかに,

$$\varphi_i \mapsto \varphi_i + \theta_{\alpha\beta} \varphi_j (L^{\alpha\beta})^j{}_i \tag{15.33}$$

のように変換するような量も考え, ψ^i のような変換をするものを反変スピノル, φ_i のような変換をするものを共変スピノルとよぼう. 定義からすぐわかるように, 反変ベクトルと共変ベクトルを縮約したもの $u_\mu v^\mu$ や反変スピノルと共変スピノルを縮約したもの $\varphi_i \psi^i$ は, Lorentz 不変である(実際, そのようになるように定義式(15.32), (15.33)を決めたのである).

Lorentz 不変な理論をつくるために重要なことは, 不変テンソルの存在である. 実際,

$$\eta^{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & \mu=\nu=0 \\ -1 & \mu=\nu=1,2,3 \\ 0 & \text{他の場合} \end{cases} \tag{15.34}$$

が Lorentz 変換に対して不変な 2 階の反変テンソルであることから, Klein-Gordon 方程式

$$\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \phi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi = 0 \tag{15.35}$$

が Lorentz 不変であることは自明である. ところで, 前節で導いた $L^{\mu\nu}$ と γ^α の交換関係

$$[L^{\mu\nu}, \gamma^\alpha] = \eta^{\nu\alpha}\gamma^\mu - \eta^{\mu\alpha}\gamma^\nu \tag{15.20}$$

は, γ^μ を成分で表した $(\gamma^\mu)^i{}_j$ を反変ベクトルの足 μ, 反変スピノルの足 i, 共変スピノルの足 j の 3 つの添字をもった高階の量とみなしたときに不変テンソルになっていることを示している[1].

例題 1 $(\gamma^\mu)^i{}_j$ が不変テンソルであることを示せ.

解 (15.15)によって定義された $(L'^{\mu\nu})^\alpha{}_\beta$ を使うと, (15.20)の右辺は, $-(L'^{\mu\nu})^\alpha{}_\beta \gamma^\beta$ と書けるから, (15.20)は,

1) ここで考えているような量 $(\gamma^\mu)^i{}_j$ は, ベクトルの添字とスピノルの添字の両方をもっているが, 簡単のため, そのようなものもテンソルとよぼう.

$$[L^{\mu\nu}, \gamma^\alpha]+(L'^{\mu\nu})^\alpha{}_\beta\gamma^\beta=0$$

となる．この式の両辺の行列の成分を陽に書くと，

$$(L^{\mu\nu})^i{}_k(\gamma^\alpha)^k{}_j-(\gamma^\alpha)^i{}_k(L^{\mu\nu})^k{}_j+(L'^{\mu\nu})^\alpha{}_\beta(\gamma^\beta)^i{}_j=0 \qquad ⓐ$$

と書ける．両辺に $-\theta_{\mu\nu}$ をかけて，左辺の第1項を(15.31)と，第2項を(15.33)と，第3項を(15.30)と比べてみればわかるように，ⓐはテンソル $(\gamma^\alpha)^i{}_j$ が Lorentz 変換に対して不変であることを意味している． ▮

$(\gamma^\mu)^i{}_j$ が不変テンソルであることから，つぎのようにして，Dirac スピノルに対する共変な波動方程式が導かれる．$\psi^i(x)$ を反変な Dirac スピノルの場とする。すなわち，時空の各点 x に対して値 $\psi^i(x)$ をとる反変スピノルが与えられているとする．これを，x^μ で微分したもの $\partial_\mu\psi^i(x)$ は，2つの添字 μ と i をもつが，明らかに i については反変スピノル，μ については共変ベクトルである．よって，これに $(\gamma^\nu)^j{}_k$ をかけたもの $(\gamma^\nu)^j{}_k\partial_\mu\psi^i(x)$ は，5つの添字 i, j, k, μ, ν をもつテンソンであるが，i と j については反変スピノル，k については共変スピノル，μ については共変ベクトル，ν については反変ベクトルである．よって，$(\gamma^\nu)^j{}_k\partial_\mu\psi^i(x)$ を μ と ν, i と k について縮約したもの $(\gamma^\mu)^j{}_i\partial_\mu\psi^i(x)$ は，j という添字をもつ反変スピノルである．このことから，方程式

$$i\hbar(\gamma^\mu)^j{}_i\partial_\mu\psi^i(x)-mc\psi^j(x)=0 \qquad (15.36)$$

を考えると，左辺の2つの項はともに反変スピノルであるから，これは Lorentz 共変な式になっていることがわかる．ここで m は定数であり，あとの便宜のために，左辺第1項には Planck 定数 $\hbar$ と虚数単位 i をかけておいた．$\psi^i(x)$ $(i=1,2,3,4)$ の4つの成分をたてベクトルとしたもの

$$\psi(x)=\begin{pmatrix}\psi^1(x)\\ \psi^2(x)\\ \psi^3(x)\\ \psi^4(x)\end{pmatrix} \qquad (15.37)$$

を使って(15.36)を書きなおすと，

$$i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi-mc\psi=0 \qquad (15.38)$$

となるが，これは，Dirac 方程式とよばれている．

Dirac スピノルは，前節で調べたように，非相対論的な2成分スピノルを Lorentz 共変になるように拡張したものであるから，Dirac 方程式(15.38)はスピン $\frac{1}{2}$ の粒子を相対論的に記述していることが期待される．次節以下で実際にそうなっている

ことを調べるが，そのための第一歩として，つぎの例題で Dirac 方程式から Klein-Gordon 方程式が導かれることをみておこう．

例題 2 Dirac スピノルの場 $\psi(x)$ が Dirac 方程式(15.38)をみたすならば，それは，Klein-Gordon 方程式

$$\eta^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu\psi+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi=0 \tag{①}$$

を自動的にみたすことを示せ．

解 (15.38)の両辺に左から微分演算子 $(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu+mc)$ を作用させると，

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu+mc)(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu-mc)\psi=0 \tag{ⓐ}$$

となる．この左辺に現れる演算子は，

$$\begin{aligned}&(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu+mc)(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu-mc)\\&=(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu)^2-(mc)^2\\&=(i\hbar)^2\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu-(mc)^2\\&=(i\hbar)^2\frac{1}{2}\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}\partial_\mu\partial_\nu-(mc)^2\\&=(i\hbar)^2\eta^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu-(mc)^2\end{aligned} \tag{ⓑ}$$

となる．ここで，3 行目から 4 行目へ移るために，$\partial_\mu\partial_\nu$ が μ と ν の入れかえに対して不変であることを使った．ⓐとⓑよりただちに①が得られる．①をスカラー場の場合と比べると，m が粒子の質量を表していることがわかるだろう． ▮

15.3 粒子と反粒子

(a) Dirac 粒子の 1 体問題

スピノル場に対する共変な波動方程式として Dirac 方程式(15.38)を導いたが，これを，非相対論的な Schrödinger 方程式を相対論化したものであるとみなそう．そのために，(15.38)で時間に対する微分を含む項を左辺に残し，残りの項を右辺へ移項して，

$$i\hbar\frac{1}{c}\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(\frac{\hbar}{i}\gamma^i\frac{\partial}{\partial x^i}+mc\right)\psi \tag{15.39}$$

と書き，さらに両辺に $c\gamma^0$ をかけて，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(c\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+mc^2\beta\right)\psi \tag{15.40a}$$

$$\alpha^i=\gamma^0\gamma^i,\qquad\beta=\gamma^0 \tag{15.40b}$$

と変形しよう．ここで，(15.40a)の右辺の演算子をハミルトニアンとみなすと，(15.

40a)は，非相対論的な Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2\psi \tag{15.41}$$

と対比すべきものであることがわかるだろう．非相対論的なスピン $\frac{1}{2}$ の粒子を考えるためには，(15.41)で ψ を2成分スピノルとみなせばよかったが，(15.40)は，その2倍の4成分量に対する方程式になっている．あとでわかるように，これは粒子と反粒子の自由度に対応している．このように，(15.40)を相対論的粒子の Schrödinger 方程式とみなすことにすると，ハミルトニアン

$$\begin{aligned}\hat{H}&=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}+mc^2\beta\\&=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta\end{aligned} \tag{15.42}$$

はエルミートでなければならないが，そのためには，$\boldsymbol{\alpha}$ および β がエルミート行列であればよい．$\boldsymbol{\alpha}$ および β は，(15.40b)で与えられているから，けっきょく

$$\gamma^0 \text{ はエルミート} \qquad (\gamma^0)^\dagger=\gamma^0 \tag{15.43a}$$

$$\gamma^i \text{ は交代エルミート} \qquad (\gamma^i)^\dagger=-\gamma^i \tag{15.43b}$$

とするべきであることがわかる．(15.25)で与えた標準表示は，たしかにこの条件をみたしている．

例題 1 (15.40b)で定義された $\boldsymbol{\alpha}$ および β がエルミートであるための条件は，γ^0 がエルミートであり，γ^i が交代エルミートであることを示せ．

解 $\beta=\gamma^0$ だから，当然 β がエルミートであるためには γ^0 はエルミートであればよい．そうすると，$\alpha^i=\gamma^0\gamma^i$ より，

$$(\alpha^i)^\dagger=(\gamma^0\gamma^i)^\dagger=(\gamma^i)^\dagger(\gamma^0)^\dagger=(\gamma^i)^\dagger\gamma^0$$

だから，$(\alpha_i)^\dagger=\alpha_i$ は，

$$(\gamma^i)^\dagger\gamma^0=\gamma^0\gamma^i$$

と等価であり，両辺に右から γ^0 をかけると，これはさらに，

$$(\gamma^i)^\dagger=\gamma^0\gamma^i\gamma^0=-\gamma^i$$

と等価である．すなわち，γ^i は交代エルミートであればよい． ∎

Dirac スピノルの成分および行列 $\boldsymbol{\alpha}$，β の意味を調べるために角運動量の演算子を定義しておこう．そのためには，Heisenberg 表示を使うのが便利であるから，(15.42)において，$\boldsymbol{\alpha}$ も β も抽象的な演算子としてあつかい $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$，$\hat{\beta}$ と書こう．すなわち，

$$\hat{H}=c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\hat{\beta} \tag{15.44}$$

と書き，ここに現れる演算子は正準交換関係

$$[\hat{x}^i, \hat{p}^j]=i\hbar\delta^{ij}, [\hat{x}^i,\hat{x}^j]=0, [\hat{p}^i,\hat{p}^j]=0 \tag{15.45a}$$

に加えて，

$$\{\hat{\alpha}^i, \hat{\alpha}^j\}=2\delta^{ij},\quad \hat{\beta}^2=1,\quad \{\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}\}=0 \tag{15.45b}$$

および，

$$\hat{x}^i,\ \hat{p}^j \text{ と } \hat{\alpha}^i,\ \hat{\beta} \text{ は可換} \tag{15.45c}$$

によって定義されているものとする．なぜならば，(15.42)に現れる行列 $\boldsymbol{\alpha}$，β は座標 $\boldsymbol{x}$ とは独立なものであり，それらの間では反交換関係

$$\{\alpha^i, \alpha^j\}=2\delta^{ij},\quad \beta^2=1,\quad \{\alpha^i, \beta\}=0 \tag{15.46}$$

をみたしているからである．

このようにすると，Heisenberg 表示での演算子の時間発展を書くことができるが，とくに，

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{x}}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{x}}]=c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \tag{15.47a}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{p}}]=0 \tag{15.47b}$$

となるから，軌道角運動量

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}} \tag{15.48}$$

の時間発展は，

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{L}}=c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{p}} \tag{15.49}$$

で与えられる．ここで，スピン角運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ を，

$$\hat{\boldsymbol{S}}=-\frac{i\hbar}{4}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{\alpha}} \tag{15.50}$$

すなわち，

$$\hat{S}^i=-\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ijk}\hat{\alpha}^j\hat{\alpha}^k \tag{15.50$'$}$$

で定義すると，つぎの例題のようにして，

$$[\hat{S}^i, \hat{\alpha}^j]=i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{\alpha}^k \tag{15.51}$$

が示され，これから，

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{S}}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{S}}]=-c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{p}} \tag{15.52}$$

が得られる．(15.49)と(15.52)より，全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ を，

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{i\hbar}{4}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{\alpha}} \tag{15.53}$$

で定義すると，それは保存すること

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{J}}=\mathbf{0} \tag{15.54}$$

がわかる[1]．

例題 2 $\hat{S}$ を(15.50)で定義すると(15.51)および(15.52)をみたすことを示せ．さらに，$\hat{S}$ どうしは角運動量の交換関係

$$[\hat{S}^i, \hat{S}^j]=i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{S}^k \qquad ①$$

をみたすことを示せ．

解 (i)

$$\begin{aligned}[\hat{S}^i, \hat{\alpha}^j]&=-\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ikl}[\hat{\alpha}^k\hat{\alpha}^l, \hat{\alpha}^j]\\ &=-\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ikl}(\hat{\alpha}^k\{\hat{\alpha}^l, \hat{\alpha}^j\}-\{\hat{\alpha}^k, \hat{\alpha}^j\}\hat{\alpha}^l)\\ &=-\frac{i\hbar}{4}\varepsilon^{ikl}(\hat{\alpha}^k 2\delta^{lj}-2\delta^{kj}\hat{\alpha}^l)\\ &=i\hbar\varepsilon^{ijl}\hat{\alpha}^l\end{aligned}$$

ここで，1行目から2行目へ移るには，公式

$$[AB, C]=A\{B, C\}-\{A, C\}B$$

を用いた．

(ii)

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{S}^i]&=\frac{i}{\hbar}c\hat{p}^j[\hat{\alpha}^j, \hat{S}^i]=\frac{i}{\hbar}c\hat{p}^j(-i\hbar)\varepsilon^{ijl}\hat{\alpha}^l\\ &=c\varepsilon^{ijl}\hat{p}^j\hat{\alpha}^l\end{aligned}$$

より，$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{S}}]=-c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ を得る．

(iii) (15.51)は，$\hat{\boldsymbol{S}}$ によって生成される無限小変換に対して $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ がベクトルとして変換することを示しているから，2つの $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ の外積 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\boldsymbol{\alpha}}$，あるいは，それに定数 $-\frac{i\hbar}{4}$ をかけて得られる $\hat{\boldsymbol{S}}$ じしんもベクトルとして変換する．よって，(15.51)の両辺で $\hat{\alpha}^i$ を $\hat{S}^i$ におきかえた式

$$[\hat{S}^i, \hat{S}^j]=i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{S}^k$$

が成り立つ． ∎

つぎにハミルトニアン $\hat{H}$ (15.42)を対角化して，エネルギー固有値を求めよう．$\hat{H}$ は，明らかに運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ と可換であるから，これらは同時対角化できる．よって，運動量の固有値が $\boldsymbol{p}$ であるような固有空間の構造を調べよう．(15.42)で演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ をその固有値 $\boldsymbol{p}$ でおきかえると，$\hat{H}$ は4行4列の行列になるから，$\hat{H}$ を対角化する

1) ここで得られたスピン演算子 $\hat{S}^i$(15.50)は，スピノルに対する回転の生成子(15.28)とたしかに一致していることに注意しておこう．

ためには，4次元の固有値方程式

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta)\psi(\boldsymbol{p})=E\psi(\boldsymbol{p}) \tag{15.55}$$

を解けばよい．以下の計算を具体的にすすめるために，γ 行列として標準表示(15.25)のものをとろう．そうすると，

$$\alpha^i=\gamma^0\gamma^i=\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ \sigma^i & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\gamma^0=\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix} \tag{15.56}$$

であるから，$\psi(\boldsymbol{p})$ を2成分ずつに分けて，

$$\psi(\boldsymbol{p})=\begin{pmatrix}\xi(\boldsymbol{p})\\ \eta(\boldsymbol{p})\end{pmatrix} \tag{15.57}$$

と書くと，(15.55)は，

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\eta(\boldsymbol{p})+mc^2\xi(\boldsymbol{p})=E\xi(\boldsymbol{p}) \tag{15.58a}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\xi(\boldsymbol{p})-mc^2\eta(\boldsymbol{p})=E\eta(\boldsymbol{p}) \tag{15.58b}$$

となる．

まず，$\boldsymbol{p}=\mathbf{0}$ の場合，すなわち粒子が静止している場合を調べておこう．この場合は，(15.55)は，標準表示では，

$$mc^2\begin{pmatrix}\mathbf{1} & 0\\ 0 & -\mathbf{1}\end{pmatrix}\psi(\mathbf{0})=E\psi(\mathbf{0}) \tag{15.59}$$

となり，はじめから対角化されている．すなわち，エネルギー固有値は，$\pm mc^2$ であり，それぞれ2重に縮退している．mc^2 は質量 m の粒子の静止エネルギーに対応しており，$\boldsymbol{p}=\mathbf{0}$ の場合のエネルギーとしてもっともな値であるが，いまの場合は，エネルギーが $-mc^2$ の解もあることに注意しよう．以下でみるように，フェルミオンの1体問題が負エネルギー解をもっていても，それは理論が矛盾していることを意味しているわけではない．負エネルギー解の解釈はあとで行うことにして，それぞれのエネルギー準位 $\pm mc^2$ における2重縮退がスピンの自由度に対応していることをチェックしておこう．スピンの演算子は，(15.50)で与えられることをみたが，それは標準表示では，

$$\hat{\boldsymbol{S}}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix} \tag{15.60}$$

となる．(15.59)からわかるように，正エネルギー $E=mc^2$ をもつ解は，ψ の4成分のうち，上の2つの成分であるが，スピンの演算子(15.60)はその2つの成分のなす空間に $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ として働いている．よって，正エネルギーをもつ静止している粒子は，

たしかにスピン $\frac{1}{2}$ をもっていることがわかる．一方，負エネルギー $E=-mc^2$ をもつ解は，ψ の4成分のうち下の2つの成分であるが，この空間にもスピン演算子は $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ として働いている．つぎの例題でみるように，一般の $\boldsymbol{p}$ の値に対しても，ハミルトニアンは正負2つの固有値をもち，それぞれの固有値は，スピン $\frac{1}{2}$ に対応して2重に縮退していることがわかる．

例題 3　(1) 4行4列の行列 $\hat{H}(\boldsymbol{p})=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta$ の2乗は，

$$(\hat{H}(\boldsymbol{p}))^2=(c\boldsymbol{p})^2+(mc^2)^2 \quad ①$$

となることを示し，$\hat{H}(\boldsymbol{p})$ の固有値は $E=\pm\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ であることを示せ．ここで，

$$\varepsilon_{\boldsymbol{p}}=\sqrt{(c\boldsymbol{p})^2+(mc^2)^2} \quad ②$$

とする．

(2) $E=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは，(15.58a) は (15.58b) から導かれること，および $E=-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは，(15.58b) は (15.58a) から導かれることを示せ．このことから，$E=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ および $E=-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ に対応する固有ベクトルは，それぞれ，

$$\psi(\boldsymbol{p})=(\text{規格化因子})\times\begin{pmatrix} w \\ \dfrac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2}w \end{pmatrix} \quad ③$$

および，

$$\psi(\boldsymbol{p})=(\text{規格化因子})\times\begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E-mc^2}w' \\ w' \end{pmatrix} \quad ④$$

と書けることを示せ．ここで，w，w' は，任意の2成分たてベクトルである．

(3) ③，④における規格化因子を計算することにより，1に規格化された固有ベクトルは，

$E=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のとき，

$$\psi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_{\boldsymbol{p}}}}\begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2} & w \\ \sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} & w \end{pmatrix} \quad ⑤$$

$E=-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のとき，

$$\psi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_{\boldsymbol{p}}}}\begin{pmatrix} -\sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} & w' \\ \sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2} & w' \end{pmatrix} \quad ⑥$$

と書けることを示せ．ここで，$\boldsymbol{n}$ は $\boldsymbol{p}$ 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}$ であり，w，w'

は1に規格化された任意の2成分たてベクトルである．

解 (1) $(\hat{H}(\boldsymbol{p}))^2=(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta)^2$
$$=(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})^2+(mc^2)^2\beta^2+mc^3(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\beta+\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})$$

となるが，$\boldsymbol{\alpha}$ と β は反可換だから，最後の2項は相殺する．また，

$$\beta^2=1$$
$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})^2=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\alpha^i\alpha^j p^i p^j$$
$$=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{1}{2}(\alpha^i\alpha^j+\alpha^j\alpha^i)p^i p^j$$
$$=\boldsymbol{p}^2$$

となるから，

$$(\hat{H}(\boldsymbol{p}))^2=(c\boldsymbol{p})^2+(mc^2)^2=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}{}^2 \quad ⓐ$$

であることがわかる．$\hat{H}(\boldsymbol{p})$ はエルミートな行列であるから対角化できるが，ⓐは，その固有値の2乗が $\varepsilon_{\boldsymbol{p}}{}^2$ であること，すなわち，$E=\pm\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ を示している．

(2) $E=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは $E+mc^2\neq 0$ だから，(15.58b)から，

$$\eta(\boldsymbol{p})=\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2}\xi(\boldsymbol{p}) \quad ⓑ$$

を得る．この両辺に $c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ を左からかけて，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2=\sum_{i,j}\sigma^i\sigma^j p^i p^j$$
$$=\sum_{i,j}\frac{1}{2}(\sigma^i\sigma^j+\sigma^j\sigma^i)p^i p^j=\boldsymbol{p}^2$$

を用いると，

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\,\eta(\boldsymbol{p})=\frac{c^2\boldsymbol{p}^2}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2}\xi(\boldsymbol{p})=\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}{}^2-(mc^2)^2}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2}\xi(\boldsymbol{p})$$
$$=(\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2)\xi(\boldsymbol{p})$$

となり，(15.58a)が得られる．同様に，$E=-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは $E-mc^2\neq 0$ であるから，(15.58a)より，

$$\xi(\boldsymbol{p})=\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2}\eta(\boldsymbol{p}) \quad ⓒ$$

が得られ，両辺に左から $c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ をかけると，

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\,\xi(\boldsymbol{p})=\frac{c^2\boldsymbol{p}^2}{-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2}\eta(\boldsymbol{p})=\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{p}}{}^2-(mc^2)^2}{-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-mc^2}\eta(\boldsymbol{p})$$
$$=(-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+mc^2)\eta(\boldsymbol{p})$$

となり(15.58b)が得られる．よって，$E=\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは，$\xi(\boldsymbol{p})=w$ とすると，ⓑより $\eta(\boldsymbol{p})$ が決まるので③が得られる．同様に，$E=-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ のときは，$\eta(\boldsymbol{p})=w'$ とするとⓒ

より $\xi(\boldsymbol{p})$ が決まり④が得られる．

(3) ③の規格化因子を $N(\boldsymbol{p})$ とし，w が1に規格化されているとしたとき，$\psi(\boldsymbol{p})$ は1に規格化されるとすると，

$$1=\psi^\dagger(\boldsymbol{p})\psi(\boldsymbol{p})=|N(\boldsymbol{p})|^2\left(w^\dagger,\ \frac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\varepsilon_p+mc^2}w^\dagger\right)\begin{pmatrix} w \\ \dfrac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\varepsilon_p+mc^2}w \end{pmatrix}$$

$$=|N(\boldsymbol{p})|^2\left\{1+\frac{c^2\boldsymbol{p}^2}{(\varepsilon_p+mc^2)^2}\right\} \qquad ⓓ$$

となる．ところが，

$$1+\frac{c^2\boldsymbol{p}^2}{(\varepsilon_p+mc^2)^2}=\frac{\varepsilon_p{}^2+2mc^2\varepsilon_p+(mc^2)^2+c^2\boldsymbol{p}^2}{(\varepsilon_p+mc^2)^2}$$

$$=\frac{2\varepsilon_p(\varepsilon_p+mc^2)}{(\varepsilon_p+mc^2)^2}$$

$$=\frac{2\varepsilon_p}{\varepsilon_p+mc^2}$$

であるから，ⓓより，

$$N(\boldsymbol{p})=\frac{\sqrt{\varepsilon_p+mc^2}}{\sqrt{2\varepsilon_p}}$$

としておけばよいことがわかる．そうすると，③は，

$$\psi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}}\begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon_p+mc^2} & w \\ \dfrac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{\varepsilon_p+mc^2}} & w \end{pmatrix}$$

となるが，

$$\frac{c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{\varepsilon_p+mc^2}}=\frac{c|\boldsymbol{p}|}{\sqrt{\varepsilon_p+mc^2}}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\frac{\sqrt{\varepsilon_p{}^2-(mc^2)^2}}{\sqrt{\varepsilon_p+mc^2}}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$=\sqrt{\varepsilon_p-mc^2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

であるから⑤が得られる．⑥もまったく同様に④から得られる．　∎

(b)　Dirac の海

以上によって，ハミルトニアン(15.42)で記述される1体の自由な Dirac 粒子は，運動量が $\boldsymbol{p}$ であるときはエネルギー固有値 $\pm\varepsilon_p$ をもち，それぞれは2重に縮退していることがわかった(図15.1参照)．ここで，負のエネルギーをもつ準位が現れてしまったことは，一見理論が不完全であることを意味していると思うかもしれないが，実はそうではない．理論を正しく解釈するための第1歩として，われわれが真空として認識している状態とはエネルギーが最小の状態であるとみなすべきである

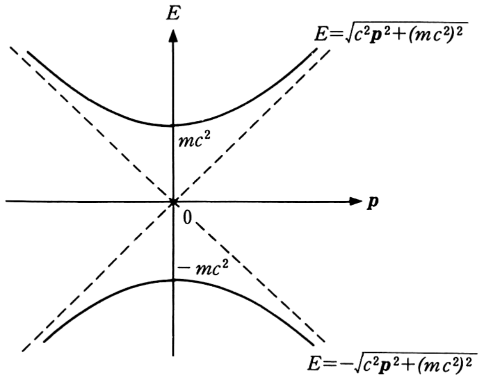


図 15.1 1体の Dirac 粒子のエネルギー準位
各 $\boldsymbol{p}$ の値に対して，エネルギーは $\pm\sqrt{c^2\boldsymbol{p}^2+(mc^2)^2}$ の 2 つの値をとりうる．各準位は，スピン $\frac{1}{2}$ に対応して 2 重に縮退している．

ことに注意しよう．そうすると，ハミルトニアン(15.42)をもつような粒子が 1 つもないような状態は真空ではないということになる．実際，図 15.1 の双曲線のうち，下の枝 $E=-\sqrt{c^2\boldsymbol{p}^2+(mc^2)^2}$ の表す準位に，粒子を 1 つつめるごとに全エネルギーには負のエネルギーがつけ加わり，どんどん全エネルギーはさがっていくことになる．いままでの議論では，Dirac 粒子がボソンであるかフェルミオンであるかは，まだ決めていなかったが，ここで，Dirac 粒子はフェルミオンであると仮定しよう．そうすると，Pauli の排他原理により，各エネルギー準位には 1 つだけしか粒子を入れることができないから，図の下の枝のすべての準位に粒子をつめたものは，全系のエネルギーが最小の状態になっているはずである．すなわち，Dirac 粒子がフェルミオンであるとすると，真空を，負エネルギー状態のすべての準位に粒子がつめられている状態と解釈することによって矛盾のない理論がつくられるわけである．逆に，Dirac 粒子がボソンであるとすると，1 つの負エネルギー状態にいくつでも粒子をつめられるから全エネルギーが最小であるような状態は存在せず，真空が定義できないことになってしまう．実際，電子やクォークのように Dirac 方程式で記述されている粒子はすべてフェルミオンであることが知られている．このように，真空を表すために Dirac 粒子の負エネルギー準位をすべてつめたような状態のことを，Dirac の海ということがある．

Dirac の海は，負エネルギー準位を全部つめたものだから，運動量 $\boldsymbol{p}$ の準位も $-\boldsymbol{p}$

の準位もつめられているわけであり，全運動量はゼロであるとみなしてよいだろう．同様に，Dirac の海は回転に対して不変なはずだから，全角運動量もゼロであるとしてよいと思われる．一方，Dirac の海のエネルギーを素朴に考えて負のエネルギー準位の総和とすると，単位体積あたり，

$$E_0 = -2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{c^2\hbar^2\boldsymbol{k}^2+(mc^2)^2} \tag{15.61}$$

ということになる．ここで，右辺の因子 2 はスピンの自由度である．これは形式的に発散している量であり，Klein-Gordon 場などボソンの場に対する真空のゼロ点振動のエネルギーの表式とよく似ているが，符号がマイナスであることがボソンの場合とちがっている．いずれにしても，通常はハミルトニアンに定数をつけ加えても理論は変わらないから，真空のエネルギーがゼロになるようにハミルトニアンを再定義しておくわけである．同様に，粒子数の演算子も真空の粒子数がゼロになるように再定義しておこう．

それでは，真空より少しだけエネルギーの高い状態としてはどのようなものがあるのだろうか．まず最初に考えられるのは，Dirac の海に加えて正エネルギーの準位，たとえば運動量 $\boldsymbol{p}$ をもちエネルギー $\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ をもつ準位に 1 つ粒子をつめた状態である．このような状態は真空に比べて運動量は $\boldsymbol{p}$ だけ大きく，エネルギーは $\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ だけ大きく，粒子数は 1 だけ大きいはずである．ところが，真空の量子数は上に述べたように再定義したから，けっきょく，いま考えている状態は，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもち質量

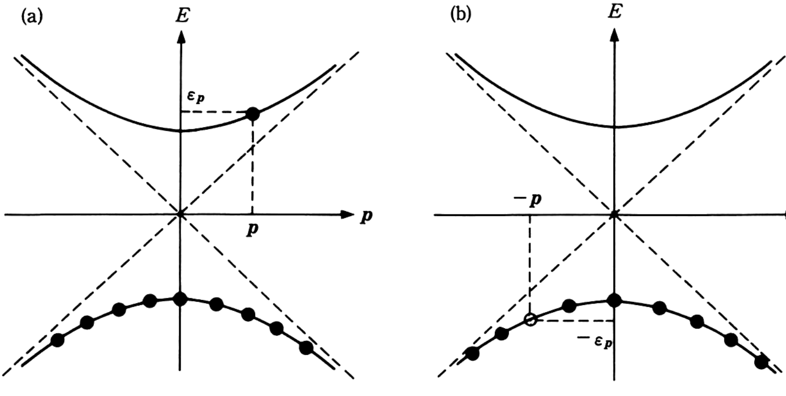


図 15.2　真空のまわりの基本的な励起
(a) Dirac の海に正エネルギー状態が 1 つつけ加わっている．粒子が 1 個ある状態を表す．
(b) Dirac の海から粒子を 1 つとり除いた．反粒子が 1 個ある状態を表す．

が m であるような粒子が1つある状態とみなせる(図15.2(a)参照). つぎに, Dirac の海から1つの粒子, たとえば運動量が $-\boldsymbol{p}$ でエネルギーが $-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ の準位にある粒子をとり除いたような状態を考えてみよう(図15.2(b)参照). このような状態は真空に比べて運動量は $-\boldsymbol{p}$ だけ小さく, エネルギーは $-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ だけ小さく, 粒子数は1だけ小さいはずである. 真空のもつこれらの量子数はすべてゼロであるから, いま考えている状態は, 粒子数 -1 をもち, 運動量が $\boldsymbol{p}$, エネルギーが $\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ であるような状態であるといえる. すなわち, 図15.2(b)のような状態は, 運動量とエネルギーに関するかぎり図15.2(a)のような状態と同じであり, 質量が m の粒子が運動量 $\boldsymbol{p}$ をもって運動している状態を表している. しかしながら, 図15.2(b)の状態は粒子数の固有値が -1 であるから, 図15.2(a)の状態とは異なる状態とみなさなければいけない. 以下では, 粒子数演算子の固有値が1であるような状態を粒子とよび, 固有値が -1 であるような状態を反粒子とよぶことにしよう.

以上のように考えると, 真空より有限なだけ多いエネルギーをもつような状態は, Dirac の海から有限個だけ粒子をとり除き, 正エネルギーの準位に有限個の粒子をつめたものであることがわかる. たとえば, Dirac の海のうち, 運動量が $-\boldsymbol{p}_1$, $-\boldsymbol{p}_2$, …, $-\boldsymbol{p}_N$ であるような N 個の粒子をとりさり, 運動量が $\boldsymbol{p}_1'$, $\boldsymbol{p}_2'$, …, $\boldsymbol{p}_M'$ であるような M 個の正エネルギー準位に粒子をつめたような状態を考えると, これは, 運動量 $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$, …, $\boldsymbol{p}_N$ の N 個の反粒子と運動量 $\boldsymbol{p}_1'$, …, $\boldsymbol{p}_M'$ の M 個の粒子がある状態を表していることがわかる.

ここで行ったように基底状態として粒子がたくさんつまった状態を考え, そのまわりでの基本的な励起を粒子とみなすという考え方は, 固体物理でもよく使われる. たとえば, 半導体の基底状態はあるエネルギー・バンドにまで電子がつまった状態であるが, その上のバンドに1つの電子をつけ加えると, もちろん, それは電荷 e の粒子のようにふるまう. 一方, 基底状態においてつめられているバンドから1つの電子をとり除くと, そこにできた穴はあたかも電荷 $-e$ の粒子のようにふるまう. このような穴のことを空孔あるいはホールとよんでいる. 通常の固体では, もちろん電子の準位と空孔の準位が同じである必然性はないので, 電子と空孔は考えている固体中で異なった質量をもった粒子のように運動するのが普通である. 一方, Dirac 方程式では, 1体のエネルギー準位は $E=\pm\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ であり, 正エネルギーと負エネルギーはまったく対称であるから, 粒子と反粒子は同じ質量をもつ.

このように, 粒子と反粒子が同じ質量をもつという事実は, 相対論的な量子力学からの一般的な帰結であり, 相互作用の効果をとり入れても厳密に成り立つことが知られている.

粒子と反粒子は，対となって消滅したり生成されたりすることができることに注意しよう．たとえば，粒子と反粒子が1つずつある状態を考えると，それは，正エネルギー準位 l_1 に粒子が1つあり，Dirac の海の負エネルギー準位 l_2 にホールがあるような状態にほかならない．そこで，準位 l_1 にあった粒子が，何かほかの系にエネルギーを放出して負エネルギー準位 l_2 におちこんだとすると，結果として，Dirac の海がちょうどつめられたことになる．これは，粒子と反粒子が，他の系にエネルギーを与えて消滅してしまったことを意味する．逆に，真空，すなわち Dirac の海に別の系からエネルギーを与えることにより，負エネルギー準位にあった粒子を1つ励起して正エネルギー準位に上げてやることもできるはずであるが，これは，真空にエネルギーを与えて粒子と反粒子をつくり出したことになる．実際，電子の系と電磁場の系との相互作用を考えることにより，

$$e^+ + e^- \rightleftarrows \gamma + \gamma \tag{15.62}$$

のような反応，すなわち，電子と陽電子が対消滅して2つの光子になったり，逆に2つの光子が衝突して電子・陽電子が対生成されたりするような過程の断面積を計算できるが，それらは，実験とよく一致している．

(c)　Dirac 場の第二量子化

Dirac 粒子を物理的に解釈しようとすると，Dirac の海のようなものを考えることになり，必然的に多体系をとりあつかうことになるから，第二量子化したほうが見通しがよい．1体問題のハミルトニアン

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta \tag{15.42}$$

の固有ベクトルは，例題3の⑤，⑥により与えられているが，それらを，

$$u_{p,\lambda}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}}\begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon_p + mc^2} & w_\lambda \\ \sqrt{\varepsilon_p - mc^2} & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\ w_\lambda \end{pmatrix} \tag{15.63a}$$

$$u_{p,\lambda}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}}\begin{pmatrix} -\sqrt{\varepsilon_p - mc^2} & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\ w_\lambda' \\ \sqrt{\varepsilon_p + mc^2} & w_\lambda' \end{pmatrix} \tag{15.63b}$$

と書こう．ここで，$u_{p,\lambda}^{(+)}$，$u_{p,\lambda}^{(-)}$ は，それぞれ正エネルギー解，負エネルギー解を表し，$\lambda=1, 2$ はスピンの自由度，すなわち2成分ベクトル w_λ および w_λ' のとり方を指定しているとする．w_λ $(\lambda=1,2)$ や w_λ' $(\lambda=1,2)$ は，おのおの2成分ベクトルの正規直交基底であればどのようにとってもよい．つぎに，状態 $u_{p,\lambda}^{(+)}$ および $u_{p,\lambda}^{(-)}$ にある粒子の消滅演算子を $c_{p,\lambda}^{(+)}$，$c_{p,\lambda}^{(-)}$ と書こう．粒子はフェルミオンとしているから，適当に規格化すると $c_{p,\lambda}^{(\pm)}$ は反交換関係

$$\left\{c_{p,\lambda}^{(\alpha)}, c_{p',\lambda'}^{(\alpha')}\right\} = \left\{c_{p,\lambda}^{(\alpha)\dagger}, c_{p',\lambda'}^{(\alpha')\dagger}\right\} = 0$$

$$\left\{c_{p,\lambda}^{(\alpha)}, c_{p',\lambda'}^{(\alpha')\dagger}\right\}=(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta^{\alpha,\alpha'}\delta_{\lambda,\lambda'} \tag{15.64}$$

をみたす．$u_{p,\lambda}^{(+)}$，$u_{p,\lambda}^{(-)}$ の運動量の固有値はともに $\boldsymbol{p}$ であり，エネルギーの固有値は，それぞれ ε_p，$-\varepsilon_p$ であるから，多体系の全エネルギーの演算子 $\hat{H}'$，全運動量の演算子 $\boldsymbol{p}'$ および粒子数の演算子 $\hat{N}'$ は，

$$\hat{H}'=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(\varepsilon_p c_{p,\lambda}^{(+)\dagger}c_{p,\lambda}^{(+)}-\varepsilon_p c_{p,\lambda}^{(-)\dagger}c_{p,\lambda}^{(-)}) \tag{15.65a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}'=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(\boldsymbol{p}c_{p,\lambda}^{(+)\dagger}c_{p,\lambda}^{(+)}+\boldsymbol{p}c_{p,\lambda}^{(-)\dagger}c_{p,\lambda}^{(-)}) \tag{15.65b}$$

$$\hat{N}'=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(c_{p,\lambda}^{(+)\dagger}c_{p,\lambda}^{(+)}+c_{p,\lambda}^{(-)\dagger}c_{p,\lambda}^{(-)}) \tag{15.65c}$$

となるはずである．実際，ゼロ粒子状態 $|0'\rangle$ を，

$$c_{p,\lambda}^{(\alpha)}|0'\rangle=0 \tag{15.66}$$

で定義すると，簡単に確かめられるように，状態

$$\begin{aligned}&|\boldsymbol{p}_1,\lambda_1,\alpha_1;\boldsymbol{p}_2,\lambda_2,\alpha_2;\cdots;\boldsymbol{p}_n,\lambda_n,\alpha_n\rangle\\&=c_{p_1,\lambda_1}^{(\alpha_1)\dagger}c_{p_2,\lambda_2}^{(\alpha_2)\dagger}\cdots c_{p_n,\lambda_n}^{(\alpha_n)\dagger}|0'\rangle\end{aligned} \tag{15.67}$$

はエネルギー，運動量および粒子数の固有値

$$E'=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varepsilon_{p_i} \tag{15.68a}$$

$$\boldsymbol{P}'=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{p}_i \tag{15.68b}$$

$$N'=n \tag{15.68c}$$

をもつ．ここで，Dirac の海に対応する状態を $|0\rangle$ と書くことにすると，$|0\rangle$ は，

$$c_{p,\lambda}^{(+)}|0\rangle=0 \tag{15.69a}$$

$$c_{p,\lambda}^{(-)\dagger}|0\rangle=0 \tag{15.69b}$$

をみたすはずである．なぜならば，$|0\rangle$ は正エネルギー準位はすべてからであり，負エネルギー準位はすべてつめられたような状態だから，正エネルギー準位の粒子はこれ以上消すことができないし，負エネルギー準位にはこれ以上粒子をつめられないからである．Dirac の海 $|0\rangle$ はゼロ粒子状態 $|0'\rangle$ からはじめて，負エネルギー準位を全部つめたものであるから，形式的には，

$$|0\rangle=\prod_{p,\lambda}c_{p,\lambda}^{(-)\dagger}|0'\rangle \tag{15.70}$$

とでも書くべきものである．この表式は，無限個の演算子の積というあまり気持ちのよくないものを含んでいるが，(15.69) を $|0\rangle$ の定義と考えることにより，(15.70) のような一見奇妙なものを考える必要はなくなる．

つぎに，粒子の消滅演算子 $a_{\boldsymbol{p},\lambda}$ および反粒子の消滅演算子 $b_{\boldsymbol{p},\lambda}$ を定義しよう．粒子を生成するということは，正エネルギー準位に粒子を1つつけ加えることであるから，明らかに，$a_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}=c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(+)\dagger}$，すなわち，

$$a_{\boldsymbol{p},\lambda}=c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(+)} \tag{15.71a}$$

が成り立つ．一方，運動量 $\boldsymbol{p}$ の反粒子を生成するということは，運動量 $-\boldsymbol{p}$ の負エネルギー準位の粒子を1つ消すことであるから，$b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}=c_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)}$，すなわち，

$$b_{\boldsymbol{p},\lambda}=c_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)\dagger} \tag{15.71b}$$

を得る．$a_{\boldsymbol{p},\lambda}$ および $b_{\boldsymbol{p},\lambda}$ を使って $\hat{H}'$, $\hat{\boldsymbol{P}}'$, $\hat{N}'$ を書きなおしてみよう．そのためには，(15.65a)～(15.65c)の右辺の第2項を，

$$c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)\dagger}c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)}=b_{-\boldsymbol{p},\lambda}b_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}=-b_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}b_{-\boldsymbol{p},\lambda}+(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{0}) \tag{15.72}$$

のように書きかえればよい．そうすると，適当に定数項をおとしたのち，$\hat{H}'$，$\hat{\boldsymbol{P}}'$，$\hat{N}'$ は，

$$\hat{H}=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(\varepsilon_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}a_{\boldsymbol{p},\lambda}+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}b_{\boldsymbol{p},\lambda}) \tag{15.73a}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(\boldsymbol{p}a_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}a_{\boldsymbol{p},\lambda}+\boldsymbol{p}b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}b_{\boldsymbol{p},\lambda}) \tag{15.73b}$$

$$\hat{N}=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(a_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}a_{\boldsymbol{p},\lambda}-b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}b_{\boldsymbol{p},\lambda}) \tag{15.73c}$$

となることがわかる．

［問題1］ Dirac 場の演算子を，

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\boldsymbol{x})&=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\alpha=\pm}u_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}\\&=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}(u_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(+)}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}a_{\boldsymbol{p},\lambda}+u_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger})\end{aligned} \tag{①}$$

で定義したとき，つぎのことを示せ．

(i)
$$\{\hat{\psi}^i(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}^j(\boldsymbol{y})\}=\{\hat{\psi}^i(\boldsymbol{x})^{\dagger},\hat{\psi}^j(\boldsymbol{y})^{\dagger}\}=0$$
$$\{\hat{\psi}^i(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}^j(\boldsymbol{y})^{\dagger}\}=\delta^{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \tag{②}$$

(ii)
$$\hat{H}'=\int d^3x\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\nabla+mc^2\beta\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{③}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}'=\int d^3x\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\nabla\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{④}$$

$$\hat{N}'=\int d^3x\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{⑤}$$

(iii) Heisenberg 表式では，$\hat{\psi}$ は，Dirac 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}=\left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\nabla+mc^2\beta\right)\hat{\psi} \tag{⑥}$$

をみたし，

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda=1}^{2}\{u_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(+)}\exp(-i\omega_{\boldsymbol{p}}t+i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})a_{\boldsymbol{p},\lambda}+u_{-\boldsymbol{p},\lambda}^{(-)}\exp(i\omega_{\boldsymbol{p}}t-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})b_{\boldsymbol{p},\lambda}^{\dagger}\} \quad ⑦$$

と表される．ここで，$\omega_{\boldsymbol{p}}=\dfrac{1}{\hbar}\varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ である．

[解]　(i) $\{u_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\}$ は正規直交基底をなしているから，反交換関係(15.64)は②と等価である．

(ii) $\hat{H}'$，$\hat{\boldsymbol{P}}'$ はそれぞれ1体の演算子 $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta$，$\hat{\boldsymbol{p}}$ に対応する多体の演算子だから，第二量子化の一般論より③，④を得る．⑤は粒子数そのものである．

(iii) $\hat{\psi}$に対するHeisenberg方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}=[\hat{\psi},\hat{H}']$$

であるが，②，③より，

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\hat{H}']=\left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\nabla+mc^2\beta\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$$

となり，⑥を得る．(15.65a)および(15.64)より，

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}=[c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)},\hat{H}']=\alpha\varepsilon_{\boldsymbol{p}}c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}$$

が得られ，これから，

$$c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}(t)=\exp\left(-i\frac{\alpha\varepsilon_{\boldsymbol{p}}}{\hbar}t\right)c_{\boldsymbol{p},\lambda}^{(\alpha)}(0)$$

がわかる．これを①に代入すると，⑦を得る．　■

第15章 章 末 問 題

［1］ 外部電磁場 A_μ の下でのDirac方程式として，

$$\gamma^\mu\left(i\hbar\partial_\mu-\frac{q}{c}A_\mu\right)\psi-mc\psi=0 \quad ①$$

の形のものを考える．ここで，q は考えている粒子の電荷である．この方程式は，自由なDirac方程式(15.38)において微分 ∂_μ を共変微分 $\partial_\mu+i\dfrac{q}{\hbar c}A_\mu$ におきかえたものである．つぎのことを示せ．

(1) 方程式①は，ゲージ変換

$$A_\mu\longmapsto A_\mu+\partial_\mu\chi$$

$$\psi \mapsto \exp\left(-i\frac{q}{\hbar c}\chi\right)\psi \qquad ②$$

に対して不変である．

(2) ①は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$$

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\right) + mc^2\beta + q\phi(\boldsymbol{x}, t) \qquad ③$$

と書きかえられる．ここで，$\phi(\boldsymbol{x}, t) = A_0(\boldsymbol{x}, t)$，($\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ の i 成分) $= -A_i(\boldsymbol{x}, t)$ とする．

(3) 標準表示で，$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ を 2 成分ずつに分けて，

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \begin{pmatrix} \xi(\boldsymbol{x}, t) \\ \eta(\boldsymbol{x}, t) \end{pmatrix}$$

とすると，③は，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\xi}{\partial t} &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\right)\eta + mc^2\xi + q\phi(\boldsymbol{x}, t)\xi \\ i\hbar\frac{\partial\eta}{\partial t} &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\right)\xi - mc^2\eta + q\phi(\boldsymbol{x}, t)\eta \end{aligned} \qquad ④$$

となる．

(4) $$\begin{aligned} \xi(\boldsymbol{x}, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right)\varphi(\boldsymbol{x}, t) \\ \eta(\boldsymbol{x}, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right)\zeta(\boldsymbol{x}, t) \end{aligned} \qquad ⑤$$

を，④に代入することにより，$\dfrac{1}{c}$ の 1 次までの非相対論的極限の式

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} + q\phi\right\}\varphi \qquad ⑥$$

を導け．よって，この粒子の g 因子は 2 である．

［解］ (1) $D_\mu = \partial_\mu + i\frac{q}{\hbar c}A_\mu$ と書くと，①は，

$$(i\hbar\gamma^\mu D_\mu - mc)\psi = 0 \qquad ⓐ$$

と書ける．ゲージ変換に対しては，A_μ が変わるから，D_μ は，

$$D_\mu \mapsto D_\mu + i\frac{q}{\hbar c}\partial_\mu\chi$$

のように変化する．よって，ⓐにゲージ変換②を施したものは，

$$i\hbar\gamma^\mu\left(D_\mu+i\frac{q}{\hbar c}\partial_\mu\chi\right)\exp\left(-i\frac{q}{\hbar c}\chi\right)\psi=0 \tag{ⓑ}$$

となるが，微分作用素として，

$$\exp\left(i\frac{q}{\hbar c}\chi\right)\left(D_\mu+i\frac{q}{\hbar c}\partial_\mu\chi\right)\exp\left(-i\frac{q}{\hbar c}\chi\right)=D_\mu$$

が成り立つから，ⓑは，ⓐの両辺に，左から $\exp\left(-i\frac{q}{\hbar c}\chi\right)$ をかけたものにすぎない．

(2) ①の両辺に左から γ^0 をかけ時間微分を含むものだけを左辺に残して，残りの項を右辺に移項すると③が得られる．

(3) 標準表示における α，β は(15.56)で与えられているから，(15.58)と同様にして④を得る．

(4) ⑤を④に代入すると，

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\zeta+q\phi\varphi \tag{ⓒ}$$

$$i\hbar\frac{\partial\zeta}{\partial t}=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi-2mc^2\zeta+q\phi\zeta \tag{ⓓ}$$

となる．ⓓの右辺第2項は c^2 に比例するが，他の項の c のべきはこれより小さいので，

$$\zeta=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi+O\left(\frac{1}{c^2}\right)$$

が得られる．これをⓒに代入すると，

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\left[\frac{1}{2m}\left\{\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right\}^2+q\phi\right]\varphi+O\left(\frac{1}{c}\right)$$

となる．ところで，

$$\begin{aligned}\left\{\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right\}^2&=\sigma^i\sigma^j\left(\hat{p}^i-\frac{q}{c}A^i\right)\left(\hat{p}^j-\frac{q}{c}A^j\right)\\&=(\delta^{ij}+i\varepsilon^{ijk}\sigma^k)\left(\hat{p}^i-\frac{q}{c}A^i\right)\left(\hat{p}^j-\frac{q}{c}A^j\right)\\&=\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+i\varepsilon^{ijk}\sigma^k\left(\hat{p}^i-\frac{q}{c}A^i\right)\left(\hat{p}^j-\frac{q}{c}A^j\right)\end{aligned}$$

であるが，右辺第2項は，

$$\begin{aligned}&i\varepsilon^{ijk}\sigma^k\frac{1}{2}\left[\hat{p}^i-\frac{q}{c}A^i,\ \hat{p}^j-\frac{q}{c}A^j\right]\\&=i\varepsilon^{ijk}\sigma^k\frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\left(-\frac{q}{c}\right)(\partial_iA^j-\partial_jA^i)\end{aligned}$$

$$=-\frac{q\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

と書けるから，⑥が示された．⑥の項 $-\frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$ は，粒子の磁気能率が $\boldsymbol{\mu}=\frac{q\hbar}{2mc}2\cdot\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}$，すなわち g 因子が2であることを示している．

［2］ 前問の分析をすすめて，$\left(\frac{1}{c}\right)^2$ の補正を考えよう．ここでは，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$ としスカラー・ポテンシャル ϕ のみ考える．前問と同様に，

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2t\right)\begin{pmatrix}\varphi(\boldsymbol{x},t)\\ \zeta(\boldsymbol{x},t)\end{pmatrix}$$

とおくと，いまの場合，φ，ζ は前問の解答ⓒ，ⓓより，

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\zeta+q\phi\varphi \qquad ①$$

$$i\hbar\frac{\partial\zeta}{\partial t}=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi-2mc^2\zeta+q\phi\zeta \qquad ②$$

をみたす．

(1) $\varphi_{\rm NR}(\boldsymbol{x},t)$ を，

$$\varphi_{\rm NR}(\boldsymbol{x},t)=\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi(\boldsymbol{x},t) \qquad ③$$

で定義すると，

$$\int d^3x\psi^\dagger(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)=\int d^3x\varphi_{\rm NR}^\dagger(\boldsymbol{x},t)\varphi_{\rm NR}(\boldsymbol{x},t)+O\left(\frac{1}{c^3}\right) \qquad ④$$

となっていることを示せ．つまり，$\varphi_{\rm NR}(\boldsymbol{x},t)$ は $\frac{1}{c^2}$ までの精度で正しく規格化されている．

(2) ②より，

$$\zeta=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi+\frac{1}{4m^2c^3}q\phi\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{4m^2c^3}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi+O\left(\frac{1}{c^4}\right) \qquad ⑤$$

を導き，①に代入することによって，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\{\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{4m^2c^2}\right)\varphi\right\}=\left\{\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+q\phi+\frac{q}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\,\phi\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+O\left(\frac{1}{c^3}\right)\right\}\varphi \qquad ⑥$$

を示せ．

(3) ③と⑥より，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{\rm NR}=\hat{H}\varphi_{\rm NR}$$

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+q\phi-\frac{(\hat{\boldsymbol{p}}^2)^2}{8m^3c^2}-\frac{q\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\hat{\boldsymbol{p}}) \\ -\frac{q\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\boldsymbol{E}+O\left(\frac{1}{c^3}\right) \qquad ⑦$$

を導け．この右辺の第4項は，$\dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}=\hat{\boldsymbol{v}}$ と書くと，

$$-\frac{1}{2}\frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{E}\times\frac{\hat{\boldsymbol{v}}}{c}\right)$$

となる．これは，粒子とともに運動している系における磁場 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{E}\times\dfrac{\hat{\boldsymbol{v}}}{c}$，および，粒子の磁気能率 $\boldsymbol{\mu}=\dfrac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}$ を使って書くと，$-\dfrac{1}{2}\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ となり，磁場中の磁気双極子のエネルギーの式の $\dfrac{1}{2}$ である．この $\dfrac{1}{2}$ は，L-S 力の議論をするときに説明なしに導入した因子であるが，実はここでみたように相対論的な効果であり，Thomas 因子とよばれている．

［解］ (1) $\zeta(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi(\boldsymbol{x},t)+O\left(\dfrac{1}{c^2}\right)$ を使うと，

$$\begin{aligned}\int d^3x\psi^\dagger(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)&=\int d^3x\{\varphi^\dagger(\boldsymbol{x},t)\varphi(\boldsymbol{x},t)+\zeta^\dagger(\boldsymbol{x},t)\zeta(\boldsymbol{x},t)\}\\&=\int d^3x\varphi^\dagger(\boldsymbol{x},t)\left(1+\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2}{4m^2c^2}\right)\varphi(\boldsymbol{x},t)+O\left(\frac{1}{c^3}\right)\\&=\int d^3x\varphi^\dagger(\boldsymbol{x},t)\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{4m^2c^2}\right)\varphi(\boldsymbol{x},t)+O\left(\frac{1}{c^3}\right)\end{aligned}$$

となるから，③によって φ_{NR} を定義すると，たしかに④が成り立つ．

(2) ②の両辺を $2mc^2$ でわって適当に移項すると，

$$\zeta=\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2mc}\varphi+\frac{q\phi}{2mc^2}\zeta-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{2mc^2}\zeta$$

となるが，この右辺の ζ を $\dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2mc}\varphi+O\left(\dfrac{1}{c^2}\right)$ でおきかえると，⑤が得られる．⑤を①に代入し，$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2=\hat{\boldsymbol{p}}^2$ を使ったのち，適当に移項すると⑥を得る．

(3) ⑥の両辺に左から $1-\dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}$ を作用させ，③およびその逆

$\varphi=\left(1-\dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_{\mathrm{NR}}+O\left(\dfrac{1}{c^3}\right)$ を使うと，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{\mathrm{NR}}=\hat{H}\varphi_{\mathrm{NR}}$$

$$\hat{H}=\left(1-\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\left\{\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+q\phi+\frac{q}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\phi\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right\}\cdot$$
$$\cdot\left(1-\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)+O\left(\frac{1}{c^3}\right)$$

を得る．これは，$\dfrac{1}{c^2}$ までの精度で，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}-\frac{(\hat{\boldsymbol{p}}^2)^2}{8m^3c^2}+\frac{q}{4m^2c^2}\left\{-\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{p}}^2\phi+\phi\hat{\boldsymbol{p}}^2)+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\right\}$$

に等しいが，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\phi(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\phi\hat{\boldsymbol{p}}^2+\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\phi)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\phi\hat{\boldsymbol{p}}^2+i\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2\phi-\phi\hat{\boldsymbol{p}}^2=2\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\phi\right)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hbar^2\Delta\phi=2i\hbar\boldsymbol{E}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hbar^2\nabla\cdot\boldsymbol{E}$$

および公式 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})$ を使って変形すると⑦が得られる．

第16章　経　路　積　分

古典力学では最も基本的なものは最小作用の原理であり，多少人工的な操作を施したのちに正準形式が得られる．一方，量子力学は歴史的には正準形式から出発することによって構成された．本書でも歴史的な順序に従って，正準量子化によって量子力学を展開してきた．しかしながら，量子力学においても作用関数はきわめて根源的な意味をもっており，ある意味で古典論の場合と同様に正準形式は付加的なものであるとみなすこともできる．このように，作用関数を前面に出して量子力学を定式化する方法は経路積分とよばれている．本章では，まず16.1節で配位空間の経路積分を議論し，つぎに16.2節で位相空間における経路積分を考え，正準量子化との関係を議論する。

16.1 最小作用の原理と経路積分

(a) 古典論における最小作用の原理

経路積分の議論をはじめる前に，古典力学における最小作用の原理についてまとめておこう．ここでは自由度 f の系を考え，その配位空間の座標 $q^{(1)}$, $q^{(2)}$, …, $q^{(f)}$ をまとめて q と書くことにする．系が時刻 $t=t_i$ に $q=q_i$ を出発し，時刻 $t=t_f$ で $q=q_f$ に達したとする．この場合に，途中の時刻 t $(t_i \leqq t \leqq t_f)$ における系の座標 $q(t)$ を決定するのが最小作用の原理である．

そのためにまず，$t=t_i$ で $q=q_i$ を出発し，$t=t_f$ で $q=q_f$ に到達するような仮想的な経路を全部考える．いいかえると，$q(t_i)=q_i$, $q(t_f)=q_f$ をみたすような関数 $q(t)$ $(t_i \leqq t \leqq t_f)$ が仮想的な経路を表しているわけであるが，そのようなものの全体を考える．つぎに，各々の仮想的経路 $q(t)$ に対して作用 $S[q(t)]$ を，

$$S[q(t)]=\int_{t_i}^{t_f} dt\ L(q(t),\ \dot{q}(t)) \tag{16.1}$$

で定義する．ここで，ラグランジアン $L(q,\ \dot{q})$ は $q^{(1)}$, …, $q^{(f)}$ および $\dot{q}^{(1)}$, …, $\dot{q}^{(f)}$ の $2f$ 個の変数の実数値関数である．$S[q(t)]$ は仮想的な経路 $q(t)$ のなす集合から実数への写像であり，汎関数の一種であることに注意しよう．経路 $q(t)$ が古典力学的な現実の運動を表すためには，汎関数 $S[q(t)]$ が停留値をとることが必要十分であるというのが，最小作用の原理である．もう少しくわしくいうと，現実の経路 $q(t)$ のまわりでは，経路を無限小だけ変化させても，作用の変化分

$$\delta S=S[q(t)+\delta q(t)]-S[q(t)] \tag{16.2}$$

はゼロである．ここで，$\delta q(t)$ は $\delta q(t_i)=\delta q(t_f)=0$ をみたすような経路の無限小変形を表している．

(b) 配位空間における経路積分

WKB 近似によると，波動関数の位相は古典的な作用を Planck 定数 $\hbar$ で割ったものと密接な関係がある．いいかえると，波動関数 ψ は作用 S を使って，大まかに

$$\psi \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \tag{16.3}$$

と表される．一方，よく知られているように，量子力学では古典力学と違って粒子は確定した軌道に沿って動くわけではないから，(16.3)は厳密な意味で成り立つとは期待できない．しかしながら，以下に示すように，作用と波動関数を厳密に結びつけることができる．

古典力学の場合と同様に，時刻 $t=t_i$ で座標 $q=q_i$ を出発し，時刻 $t=t_f$ で座標 q

$=q_f$ に到達する仮想的な経路を全部考えよう．そのような各経路 $q(t)$ $(t_i \leqq t \leqq t_f)$ に対して，作用 $S[q(t)]$ が定義されているわけである．ここで，時刻 t_i に q_i にあった系が時刻 t_f には q_f に遷移している確率振幅 $\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle$ を考えよう．そのような遷移のうち，経路 $q(t)$ に沿って起こる部分的な確率振幅が $\exp\left[\frac{i}{\hbar}S[q(t)]\right]$ で与えられるとしてみよう．そうすると，全確率振幅は，$\exp\left[\frac{i}{\hbar}S[q(t)]\right]$ をすべての経路 $q(t)$ についてたしあげたものと考えるのが自然であろう．すなわち，全確率振幅は，

$$\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle=\text{const.}\int\mathscr{D}q\exp\left[\frac{i}{\hbar}S[q(t)]\right] \tag{16.4}$$

のように書けると予想される．ここで右辺の $\int\mathscr{D}q$ は $q(t_i)=q_i$，$q(t_f)=q_f$ をみたすようなすべての経路 $q(t)$ $(t_i \leqq t \leqq t_f)$ についてのたしあげを意味しており，経路積分とよばれる．これは直観的には，

$$\int\mathscr{D}q=\prod_{t_i<t<t_f}\int dq(t) \tag{16.5}$$

のような連続無限の多重積分である．また，(16.4)の右辺で全体にかかる定数は規格化定数であり，$\int\mathscr{D}q$ の定義に応じて決めればよい．

経路積分 $\int\mathscr{D}q$ を厳密に定義して (16.4) の右辺に意味をもたせるために，t_i から t_f までの時間を N 個に等分し，$t_0=t_i$，t_1，t_2，…，t_{N-1}，$t_N=t_f$ としよう．経路 $q(t)$ を与えるかわりに，各時刻 t_j における座標 $q(t_j)=q_j$ $(j=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ N)$ を与え，$q(t)$ を折れ線で近似しよう (図 16.1 参照．とくに，両端での境界条件より，$q_0=q_i$，$q_N=q_f$ である)．そうすると，作用 (16.1) は $N-1$ 個の変数 q_1，q_2，…，q_{N-1} の関数として，

$$S[q(t)]\sim\sum_{j=0}^{N-1}L\left(q_j,\ \frac{q_{j+1}-q_j}{\Delta t}\right)\Delta t \tag{16.6}$$

で近似される．ここで，Δt は N 等分された時間間隔であり，

$$\Delta t=\frac{t_f-t_i}{N} \tag{16.7}$$

で与えられる．

このように考えると，(16.4) の右辺の経路積分を，

$$\int\mathscr{D}q\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\,L(q,\dot{q})\right]$$

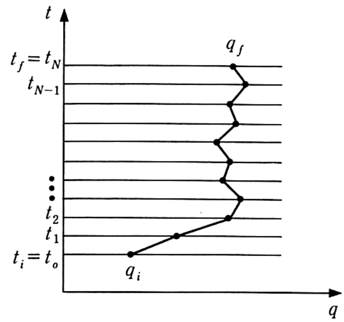


図16.1 経路積分を定義するために時間を離散化する

$$=\lim_{N\to\infty} c_N \prod_{j=1}^{N-1}\int dq_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1} L\left(q_j,\ \frac{q_{j+1}-q_j}{\Delta t}\right)\Delta t\right] \tag{16.8}$$

のように定義するのが自然であると思われる．ここで，c_N は N に依存する定数であり，右辺の $N\to\infty$ の極限が有限値となるように選ぶことにする．

具体的な例として，1 自由度の作用

$$S[q(t)]=\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(q(t),\ \dot{q}(t)) \tag{16.9a}$$

$$L(q,\ \dot{q})=\frac{m}{2}\dot{q}^2-V(q) \tag{16.9b}$$

に対して，(16.8) を適用してみよう．あとでわかるように，この場合は，$c_N=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}}$ としておけばよい．すなわち，

$$\int \mathscr{D}q \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\left\{\frac{m}{2}\dot{q}(t)^2-V(q(t))\right\}\right]$$

$$=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}\int dq_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{q_{j+1}-q_j}{\Delta t}\right)^2-V(q_j)\right\}\Delta t\right] \tag{16.10}$$

によって経路積分を定義することにする．これを評価するために，行列要素が

$$\langle q''|\hat{K}(\Delta t)|q'\rangle=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\cdot\frac{(q''-q')^2}{\Delta t}-V(q')\Delta t\right\}\right] \tag{16.11}$$

で与えられるような演算子 $\hat{K}(\Delta t)$ を導入しよう．そうすると，(16.10) の右辺は，

$$\begin{aligned}(16.10)\ \text{の右辺}&=\lim_{N\to\infty}\int dq_{N-1}\cdots dq_1\langle q_f|\hat{K}(\Delta t)|q_{N-1}\rangle\langle q_{N-1}|\hat{K}(\Delta t)|q_{N-2}\rangle\cdot\\&\qquad\cdot\cdots\langle q_2|\hat{K}(\Delta t)|q_1\rangle\langle q_1|\hat{K}(\Delta t)|q_i\rangle\\&=\lim_{N\to\infty}\langle q_f|\hat{K}(\Delta t)^N|q_i\rangle\end{aligned} \tag{16.12}$$

のように表すことができる．

計算をさらに進めるために，つぎの例題で示される公式を利用する．

例題 ε が十分に小さいとき，$\exp\left(i\frac{x^2}{2\varepsilon}\right)$ は，

$$\exp\left(i\frac{x^2}{2\varepsilon}\right)=(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\varepsilon)^n}{2^n n!}\delta^{(2n)}(x)$$

$$=(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\left\{\delta(x)+\frac{i\varepsilon}{2}\delta''(x)+O(\varepsilon^2)\right\}$$

のように展開できることを示せ．ここで，$\delta^{(n)}(x)$ は $\delta(x)$ を n 回微分したものである．

解 両辺を x について Fourier 変換したものを示せばよい．

$$(\text{左辺の Fourier 変換}) =\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(ikx)\exp\left(i\frac{x^2}{2\varepsilon}\right)$$

$$=(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-i\frac{\varepsilon}{2}k^2\right)$$

$$(\text{右辺の Fourier 変換}) =(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\, e^{ikx}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\varepsilon)^n}{2^n n!}\delta^{(2n)}(x)$$

$$=(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\varepsilon)^n}{2^n n!}(ik)^{2n}$$

$$=(2\pi i\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-i\frac{\varepsilon}{2}k^2\right)$$

であるから，たしかに等しい． ∎

この例題の公式を使うと，(16.11) の右辺は，

$$\langle q''|\hat{K}(\varDelta t)|q'\rangle=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varDelta t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{m}{2}\cdot\frac{(q''-q')^2}{\varDelta t}\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(q')\varDelta t\right]$$

$$=\{\delta(q''-q')+\varDelta t\frac{i\hbar}{2m}\delta''(q''-q')+O((\varDelta t)^2)\}\cdot$$

$$\cdot\left\{1-\varDelta t\frac{i}{\hbar}V(q')+O((\varDelta t)^2)\right\}$$

$$=\delta(q''-q')-\varDelta t\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\delta''(q''-q')+V(q')\right)+O((\varDelta t)^2)$$

$$=\langle q''|\left\{1-\varDelta t\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q})\right)\right\}|q'\rangle+O((\varDelta t)^2) \tag{16.13}$$

のように変形できる．この最後の表式に現れた演算子は，ハミルトニアンにほかならないことに注意しよう．すなわち，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q}) \tag{16.14}$$

とすると，(16.13) は，

$$\langle q''|\hat{K}(\varDelta t)|q'\rangle=\langle q''|\left(1-\frac{i}{\hbar}\varDelta t\ \hat{H}\right)|q'\rangle+O((\varDelta t)^2)$$

$$=\langle q''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varDelta t\ \hat{H}\right)|q'\rangle+O((\varDelta t)^2) \qquad (16.15)$$

と書けるから，

$$\hat{K}(\varDelta t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varDelta t\ \hat{H}\right)+O((\varDelta t)^2) \qquad (16.16)$$

であることがわかった。

これを使って，$\varDelta t=\dfrac{t_f-t_i}{N}$ に注意すると，

$$\lim_{N\to\infty}\hat{K}(\varDelta t)^N=\lim_{N\to\infty}\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varDelta t\ \hat{H}\right)+O((\varDelta t)^2)\right\}^N=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right] \qquad (16.17)$$

となるから，(16.12) よりけっきょく

$$(16.10)\ の右辺=\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle \qquad (16.18)$$

となることがわかり，はじめの予想 (16.4) が実際に成り立っていることがわかった．

ここでは具体例として1自由度の場合を考えたが，多自由度の場合でもラグランジアンが，

$$L(q,\dot{q})=\sum_{i,j=1}^{f}\frac{1}{2}m_{ij}\dot{q}^{(i)}\dot{q}^{(j)}-V(q^{(1)},\cdots,q^{(f)}) \qquad (16.19)$$

のように運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差の形をしているときは，まったく同様の議論によって (16.4) が成り立っていることがわかる．

経路積分による遷移振幅の表式 (16.4) をみると，古典力学的な極限では最小作用の原理に移行することは自明であろう．すなわち，作用の値の変化が Planck 定数 $\hbar$ に比べてずっと大きいとみなせるときには，経路積分 $\int\mathscr{D}q\exp\left[\frac{i}{\hbar}S[q]\right]$ のうちで，位相 $\frac{1}{\hbar}S[q]$ を停留にするような経路 $q(t)$ が主要な寄与を与えると思ってよいが，これは最小作用の原理にほかならない．

16.2　正準形式と経路積分

(a) 正準形式における最小作用の原理

正準量子化と経路積分の関係を調べるための準備として，古典論の正準形式における最小作用の原理をまとめておこう．配位空間における最小作用の原理

$$\delta S=0 \tag{16.20a}$$

$$S=\int_{t_i}^{t_f} dt\ L(q(t),\ \dot{q}(t)) \tag{16.20b}$$

において，形式的に $\dot{q}(t)$ を $q(t)$ と独立な変数とみなすために，新しい変数 $q'(t)$ および Lagrange の未定係数 $p(t)$ を導入して，新しい作用

$$S'=\int_{t_i}^{t_f} dt\{p(t)\cdot(\dot{q}(t)-q'(t))+L(q(t),q'(t))\} \tag{16.20b'}$$

を定義しよう[1]．そうすると，S' が停留値をとるという条件

$$\delta S'=0 \tag{16.20a'}$$

は，はじめの式 (16.20) と等価である．なぜならば，$\dfrac{\delta S'}{\delta p(t)}=0$ より $q'(t)=\dot{q}(t)$ であることがわかり，これを (16.20 b′) に代入すると，$S'=S$ となるからである．

つぎに，S' の $q'(t)$ に関する変分がゼロであるという条件

$$0=\frac{\delta S'}{\delta q'(t)}=-p(t)+\frac{\partial}{\partial q'}L(q(t),q'(t)) \tag{16.21}$$

から，$q'(t)$ を $p(t)$ と $q(t)$ で表して (16.20b′) に代入したものを

$$S''=\int_{t_i}^{t_f} dt\{p(t)\cdot\dot{q}(t)-H(q(t),p(t))\} \tag{16.20b''}$$

とする．ここで，$H(q,p)$ は，

$$H(q,p)=p\cdot q'-L(q,q')$$
$$p=\frac{\partial}{\partial q'}L(q,q') \tag{16.22}$$

で与えられる．S'' は，S' から $q'(t)$ を消去したものにほかならないから，S'' が停留値をとるという条件

$$\delta S''=0 \tag{16.20a''}$$

は，$\delta S'=0$ と等価であり，けっきょくはじめの式 (16.20) と等価である．また，停留値における値は S も S' も S'' もすべて等しいことも自明であろう．

位相空間における最小作用の原理 (16.20″) において，$q(t)$ は境界条件 $q(t_i)=q_i$，$q(t_f)=q_f$ をみたすべきであるが，$p(t)$ にはそのような境界条件はつかないことに注意しておこう．

(b) 位相空間における経路積分

位相空間における作用を使った経路積分によっても，遷移振幅が表せること，す

1)　ここでは，自由度 f の系を考え，$q^{(1)},\cdots,q^{(f)}$，$p^{(1)},\cdots,p^{(f)}$ をまとめて q，p と書くことにする．また，記号 $p\cdot q$ は $\sum_{j=1}^{f} p^{(j)}q^{(j)}$ を表すものとする．

なわち,

$$\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle$$
$$=\text{const.}\int\mathscr{D}q\mathscr{D}p\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt(p(t)\cdot\dot{q}(t)-H(q(t),p(t)))\right] \tag{16.23}$$

と書けることを示そう．ここで，右辺の $\int\mathscr{D}q\mathscr{D}p$ は，$q(t)$ については境界条件 $q(t_i)=q_i$，$q(t_f)=q_f$ をみたし，$p(t)$ についてはそのような条件がないような位相空間の任意の経路 $(q(t),p(t))$ についてのたしあげを表している．

前節と同様に，t_i と t_f の間を N 個に等分し $\left(\Delta t=\dfrac{t_f-t_i}{N}\right)$,

$$\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle$$
$$=\langle q_f|\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)\right]^N|q_i\rangle$$
$$=\int d'q_{N-1}\cdots d'q_1\langle q_f|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_{N-1}\rangle\langle q_{N-1}|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_{N-2}\rangle\cdots$$
$$\cdots\langle q_2|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_1\rangle\langle q_1|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_i\rangle \tag{16.24}$$

のように完全系を挿入してみよう．さらに運動量の固有状態の完全系を挿入して，

$$\text{上式}=\int d'p_{N-1}d'q_{N-1}d'p_{N-2}d'q_{N-2}\cdots d'p_1d'q_1d'p_0\cdot$$
$$\cdot\langle q_f|p_{N-1}\rangle\langle p_{N-1}|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_{N-1}\rangle\cdot\langle q_{N-1}|p_{N-2}\rangle\cdot$$
$$\cdot\langle p_{N-2}|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_{N-2}\rangle\cdots\cdots\langle q_2|p_1\rangle\langle p_1|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_1\rangle\cdot$$
$$\cdot\langle q_1|p_0\rangle\langle p_0|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q_i\rangle \tag{16.25}$$

と書こう．ここで，

$$\langle p|\hat{H}|q\rangle=\langle p|q\rangle H(q,p) \tag{16.26}$$

によって $H(q,p)$ を定義すると,

$$\langle q''|p\rangle\langle p|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)|q'\rangle$$
$$=\langle q''|p\rangle\langle p|\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t+O((\Delta t)^2)\right)|q'\rangle$$
$$=\langle q''|p\rangle\langle p|q'\rangle\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(q',p)\Delta t\right]+O((\Delta t)^2)$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^f}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\{p\cdot(q''-q')-H(q',p)\Delta t\}\right]+O((\Delta t)^2) \tag{16.27}$$

と変形できる．ここで f は系の自由度である．これを，(16.25)の右辺に使って $N\to\infty$ とすると，

$$\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle$$
$$=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{fN}}\int d^f p_{N-1}d^f q_{N-1}\cdots d^f p_1 d^f q_1 d^f p_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\{p_j\cdot(q_{j+1}-q_j)-H(q_j,p_j)\Delta t\}\right] \tag{16.28}$$

と書けることがわかる．この右辺によって経路積分

$$\int\mathscr{D}q\mathscr{D}p\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\{p(t)\cdot\dot{q}(t)-H(q(t),p(t))\}\right]$$

が定義されているとすると，(16.28) は (16.23) にほかならない．

具体例として自由度1の系を考え，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q}) \tag{16.29}$$

のように，運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和であるとする．この場合 (16.26) によって定義される $H(q,p)$ は単に (16.29) で $\hat{p}$，$\hat{q}$ を p，q におきかえたものである．よって，(16.28) はこの場合，

$$\langle q_f|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right]|q_i\rangle$$
$$=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{(2\pi\hbar)^N}\int\prod_{j=0}^{N-1}dq_j\int\prod_{j=0}^{N}dp_j\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left\{p_j(q_{j+1}-q_j)-\frac{p_j^2}{2m}\Delta t-V(q_j)\Delta t\right\}\right] \tag{16.30}$$

となるが，p_j ($j=0$, 1, 2, …, N) に関する積分は Gauss 積分であるからすぐに実行できて，前節の結果 (16.10) が得られる．

［問題 1］　自由度 f の系のハミルトニアンが，

$$\hat{H}=\sum_{j=1}^{f}\frac{\hat{p}^{(j)2}}{2m_j}+V(\hat{q}^{(1)},\cdots,\hat{q}^{(f)})$$

のような形をしているとき，位相空間における経路積分

$$\int\mathscr{D}q\mathscr{D}p\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\left\{\sum_{j=1}^{f}p^{(j)}(t)\dot{q}^{(j)}(t)-\left(\sum_{j=1}^{f}\frac{1}{2m_j}p^{(j)}(t)^2+V(q^{(1)}(t),\cdots,q^{(f)}(t))\right)\right\}\right] \tag{①}$$

において，$p(t)$ に関する経路積分を実行してしまうと，

$$\text{const.}\int \mathscr{D}q\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\left\{\sum_{j=1}^{f}\frac{m_j}{2}\dot{q}^{(j)}(t)^2-V(q^{(1)}(t),\cdots,q^{(f)}(t))\right\}\right] \qquad ②$$

となり，配位空間における経路積分の形になることを示せ．

［解］　表式①における指数関数の肩を $p^{(j)}(t)$ に関して平方完成すると，

$$\int \mathscr{D}q\mathscr{D}p\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\left\{-\sum_{j=1}^{f}\frac{1}{2m_j}(p^{(j)}(t)-m_j\dot{q}^{(j)}(t))^2\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sum_{j=1}^{f}\frac{m_j}{2}\dot{q}^{(j)}(t)^2-V(q^{(1)}(t),\cdots,q^{(f)}(t))\right\}\right]$$

となる．$r^{(j)}(t)=p^{(j)}(t)-m_j\dot{q}^{(j)}(t)$ によって新しい変数 $r^{(j)}(t)$ を導入すると，上式は，

$$\int \mathscr{D}q\mathscr{D}r\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\left\{-\sum_{j=1}^{f}\frac{1}{2m_j}r^{(j)}(t)^2\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sum_{j=1}^{f}\frac{m_j}{2}\dot{q}^{(j)}(t)^2-V(q^{(1)}(t),\cdots,q^{(f)}(t))\right\}\right]$$

となり，$r^{(j)}(t)$ に関する経路積分は全体にかかる定数因子となってしまい，表式②が得られる．　■

第16章　章　末　問　題

［1］　作用が $S[x(t)]=\int_{t_1}^{t_2}dt\frac{m}{2}\dot{x}^2$ で与えられるような1次元の自由粒子を考える．時刻 $t=t_i$ で $x=x_i$ にあったものが，時刻 $t=t_f$ で $x=x_f$ にくる遷移振幅は，経路積分により，

$$T(t_f,x_f\,;\,t_i,x_i)=\int_{\substack{x(t_i)=x_i\\x(t_f)=x_f}}\mathscr{D}x\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right) \qquad ①$$

と表される．$t=t_i$ に $x=x_i$ を出発し，$t=t_f$ で $x=x_f$ に到達するような古典解を $x_{\rm cl}(t)$ とし，$x(t)$ を $x_{\rm cl}(t)$ とそれからのずれ $\tilde{x}(t)$ との和の形

$$x(t)=x_{\rm cl}(t)+\tilde{x}(t)$$

に書こう．

(1) $\tilde{x}$ は $\tilde{x}(t_i)=\tilde{x}(t_f)=0$ という境界条件をみたし，また，

$$S[x(t)]=S[x_{\rm cl}(t)]+S[\tilde{x}(t)] \qquad ②$$

となることを示せ．

(2) ①，②より

$$T(t_f,x_f\,;\,t_i,x_i)=c(t_f,t_i)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x_{\rm cl}(t)]\right) \qquad ③$$

を導け．ここで，$c(t_f,t_i)$ は t_i，t_f だけの関数であり，x_f，x_i に依存しない．

(3) ハミルトニアン $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ を使って，

$$T(t_f, x_f\ ;\ t_i, x_i)=\langle x_f|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right)|x_i\rangle \qquad ④$$

を計算し，③と比べよ．

［解］ (1) $S[x(t)]=\int_{t_1}^{t_2}dt\frac{m}{2}\dot{x}^2$ は，$x(t)$ について2次式であるから，

$S[x(t)]=S[x_{cl}(t)+\tilde{x}(t)]$ を $\tilde{x}(t)$ について展開すると，0次，1次，2次の部分からなるはずである．ところが，$x_{cl}(t)$ は古典解であるから，作用 $S[x(t)]$ を停留値にしているはずである．よって $\tilde{x}(t)$ の1次の部分はゼロになっているはずである．ところで，$\dot{x}^2=(\dot{x}_{cl}+\dot{\tilde{x}})^2=\dot{x}_{cl}{}^2+2\dot{x}_{cl}\dot{\tilde{x}}+\dot{\tilde{x}}^2$

であるから，$\tilde{x}$ について0次の部分は，もちろん $S[x_{cl}(t)]$ であり，$\tilde{x}$ について2次の部分は $S[\tilde{x}(t)]$ と書ける．よって②が示された．$\tilde{x}(t)=x(t)-x_{cl}(t)$ であり，$x(t)$，$x_{cl}(t)$ はともに $t=t_i$ で値 x_i をとり，$t=t_f$ で値 x_f をとるから，当然 $\tilde{x}(t_i)=\tilde{x}(t_f)=0$ である．

(2) ②を①に代入して，経路積分の積分変数を $x(t)$ から $\tilde{x}(t)$ にとりかえる．各 t の値に対し，$x(t)$ と $\tilde{x}(t)$ は定数 $x_{cl}(t)$ だけずれているだけだから，$x(t)$ を $\tilde{x}(t)$ にとりかえても経路積分の測度は不変のはずである．よって，

$$T(t_f, x_f\ ;\ t_i, x_i)=\int_{\substack{\tilde{x}(t_i)=0\\ \tilde{x}(t_f)=0}}\mathscr{D}\tilde{x}\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]+\frac{i}{\hbar}S[\tilde{x}(t)]\right)$$

を得る．$c(t_f, t_i)$ を

$$c(t_f, t_i)=\int_{\substack{\tilde{x}(t_i)=0\\ \tilde{x}(t_f)=0}}\mathscr{D}\tilde{x}\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[\tilde{x}(t)]\right)$$

で定義すると，これは t_i と t_f だけの関数であり，③が得られる．

(3) $x_{cl}(t)=\frac{x_f-x_i}{t_f-t_i}(t-t_i)+x_i$ だから，$S[x_{cl}(t)]=\frac{m}{2}\frac{(x_f-x_i)^2}{t_f-t_i}$ となり，③より，

$$T(t_f, x_f\ ;\ t_i, x_i)=c(t_f, t_i)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_f-x_i)^2}{t_f-t_i}\right\} \qquad ⓐ$$

が得られる．一方，④より計算すると，

$$\begin{aligned}T(t_f, x_f\ ;\ t_i, x_i)&=\int dp\langle x_f|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f-t_i)\right\}|p\rangle\langle p|x_i\rangle\\&=\int dp\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f-t_i)\right\}\langle x_f|p\rangle\langle p|x_i\rangle\\&=\int\frac{dp}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f-t_i)\right\}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}p(x_f-x_i)\right\}\end{aligned}$$

$$=\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar(t_f-t_i)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_f-x_i)^2}{t_f-t_i}\right\} \qquad ⓑ$$

を得るが，ここで $c(t_f, t_i)=\sqrt{\dfrac{m}{i2\pi\hbar(t_f-t_i)}}$ とすると，たしかにⓐとⓑは一致している．

付　　　　録

C. Airy　関　数

C-1　Airy 関数の積分表示

つぎのような複素積分で与えられる関数 $\Phi(x)$ を Airy 関数とよぶ．

$$\Phi(x)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}\,i}\int_C dt\,\exp\left(-xt+\frac{1}{3}t^3\right) \tag{C.1}$$

ここで積分路 C は図 1 のように，複素 t 平面の右下のくさびの内部の無限遠方からやって来て，右上のくさびの内部の無限遠方へと出ていくものとする．

このように定義した関数 $\Phi(x)$ は，微分方程式

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-x\right)\Phi(x)=0 \tag{C.2}$$

をみたすことに注意しよう．なぜならば，(C.1) より，

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-x\right)\Phi(x)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}\,i}\left(\frac{d^2}{dx^2}-x\right)\int_C dt\,\exp\left(-xt+\frac{1}{3}t^3\right)$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{\pi}\,i}\int_C dt\,(t^2-x)\exp\left(-xt+\frac{1}{3}t^3\right)$$

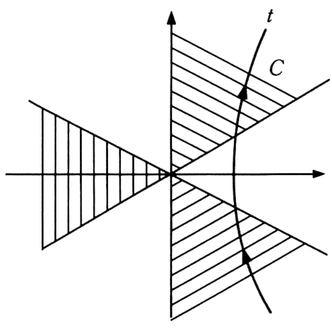


図 1　Airy 関数の積分路 C
各くさびは 60° の開きである．

$$=\frac{1}{2\sqrt{\pi}\,i}\int_C dt\frac{d}{dt}\exp\left(-xt+\frac{1}{3}t^3\right) \tag{C.3}$$

となるが，積分路 C が図1のようにとってあると，表面項は消えるからである．

C-2　Airy 関数の漸近形

Airy 関数の $x\to\pm\infty$ における漸近形をあん点法で求めよう．

$x\to+\infty$ の漸近形

この場合，$\Phi(x)$ の積分表示式(C.1)で，

$$t=x^{\frac{1}{2}}s \tag{C.4}$$

のように変数変換すると，

$$\Phi(x)=\frac{x^{\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\pi}\,i}\int_C ds\exp\left[x^{\frac{3}{2}}\left(-s+\frac{1}{3}s^3\right)\right] \tag{C.5}$$

となる．被積分関数のあん点は，$s=\pm1$ であるから，積分路を図2のようにとればよい．$s=1$ の付近を，

$$s=1+i\xi \tag{C.6}$$

と表すと，(C.5)は，

$$\begin{aligned}\Phi(x)&=\frac{x^{\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\pi}}\int d\xi\exp\left[x^{\frac{3}{2}}\left(-\frac{2}{3}-\xi^2+O(\xi^3)\right)\right]\\&=\frac{1}{2}x^{-\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)(1+O(x^{-\frac{3}{2}}))\end{aligned} \tag{C.7}$$

のように評価できる．けっきょく，$x\to+\infty$ における漸近形

$$\Phi(x)\sim\frac{1}{2x^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)\qquad(x\to+\infty) \tag{C.8}$$

が得られた．

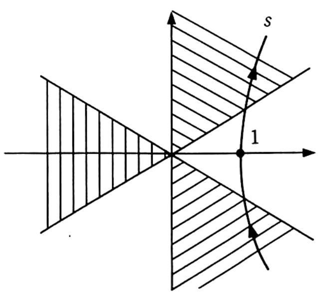


図2　$x\to-\infty$ での漸近形を求めるための積分路

$x\to-\infty$ の漸近形

この場合は，$\Phi(x)$ の積分表示式(C.1)で，

$$t=|x|^{\frac{1}{2}}u=(-x)^{\frac{1}{2}}u \tag{C.9}$$

のように変数変換すると，

$$\Phi(x)=\frac{|x|^{\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\pi}i}\int_C du\exp\left[|x|^{\frac{3}{2}}\left(u+\frac{1}{3}u^3\right)\right] \tag{C.10}$$

となる．被積分関数のあん点は $u=\pm i$ であるから，積分路を図3のようにとればよい．$u=i$ の付近を，

$$u=i+\sqrt{i}\eta$$

と表すと，(C.10)の右辺の積分に対する $u=i$ 付近からの寄与は，

$$\begin{aligned}&\sqrt{i}\int d\eta\exp\left[|x|^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2}{3}i-\eta^2+O(\eta^3)\right)\right]\\&=\sqrt{\pi}|x|^{-\frac{3}{4}}\exp\left[i\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)\right](1+O(|x|^{-\frac{3}{2}}))\end{aligned} \tag{C.11}$$

となる．一方，(C.10)の右辺の積分に対する $u=-i$ 付近の寄与は，(C.11)の複素共役の符号を変えたものであるから，2つの寄与をたすと，

$$\begin{aligned}\Phi(x)&=\frac{|x|^{\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\pi}\,i}\left\{\sqrt{\pi}|x|^{-\frac{3}{4}}\exp\left[i\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)\right]-\text{c.c.}\right\}(1+O(|x|^{-\frac{3}{2}}))\\&=|x|^{-\frac{1}{4}}\sin\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)(1+O(|x|^{-\frac{3}{2}}))\end{aligned} \tag{C.12}$$

となる．けっきょく，$x\to-\infty$ におけるつぎの漸近形が得られる．

$$\Phi(x)\sim\frac{1}{|x|^{\frac{1}{4}}}\sin\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)\qquad(x\to-\infty) \tag{C.13}$$

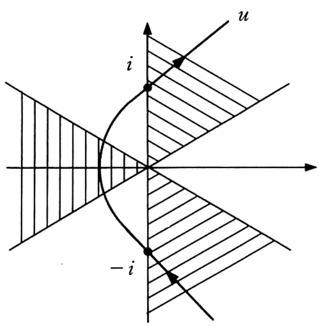


図3　$x\to\infty$ での漸近形を求めるための積分路

欧文人名索引

(配列はアルファベット順，Ⅰ，Ⅱは第Ⅰ巻，第Ⅱ巻を表す)

事 項 索 引

(配列は50音順, I, IIは第I巻, 第II巻を表す)

【な，に，の】

【は】

【ひ】

【ふ】

【へ】

【ほ】

【ま, む, も】

【や, ゆ, よ】

【ら】

【り】

【る，れ，ろ】

著者紹介

猪木　慶治（いぎ けいじ）

1933年岡山県出身．1956年東京大学理学部物理学科卒．同大学院を終了後，東京教育大学理学部助手，東京大学理学部講師，同助教授，同教授を経て1994年より東京大学名誉教授，1994～2004年神奈川大学理学部教授．その間，米カリフォルニア大学バークレー校研究員，プリンストン高級研究所所員，ヨーロッパ連合原子核研究機関(CERN)客員科学者として研究．専攻は素粒子論．理学博士．

川合　光（かわい ひかる）

1955年大阪府出身．1978年東京大学理学部物理学科卒．同大学院を終了後，米コーネル大学研究員，同助教授を経て，1988年東京大学理学部助教授，1993年高エネルギー物理学研究所理論部教授，1999年より京都大学大学院理学研究科教授．2002年より理化学研究所仁科加速器センター主任研究員を兼務．専攻は素粒子論．理学博士．

NDC 423　　336 p　　22 cm

量子力学II

1994年３月30日　第１刷発行
2014年２月10日　第20刷発行

著　者　猪木慶治・川合 光
発行者　鈴木　哲
発行所　株式会社　講談社
〒112-8001 東京都文京区音羽2-12-21
販売部　(03)5395-3622
業務部　(03)5395-3615
編　集　株式会社　講談社サイエンティフィク
代表　矢吹俊吉
〒162-0825 東京都新宿区神楽坂 2-14　ノービィビル
編集部　(03)3235-3701
印刷所　株式会社廣済堂・半七写真印刷工業株式会社
製本所　島田製本株式会社

落丁本・乱丁本は，購入書店名を明記のうえ，講談社業務部宛にお送り下さい．送料小社負担にてお取替えします．なお，この本の内容についてのお問い合わせは講談社サイエンティフィク編集部宛にお願いいたします．定価はカバーに表示してあります．